

Eine Lösungstheorie für Mehrteilchensysteme mit Spin

von
Helmut Näpfel
aus München

1967



Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41533916_0030

Eine Lösungstheorie für Mehrteilchensysteme mit Spin

Der Naturwissenschaftlichen Fakultät
der Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg

zur

Erlangung des Doktorgrades

vorgelegt von

Helmut Näpfel

aus München

Erlangen 1967

Als Dissertation genehmigt
von der Naturwissenschaftlichen Fakultät
der Universität Erlangen - Nürnberg



Tag der mündlichen Prüfung: 24. Mai 1967

Dekan:	Professor Dr. K. Brodersen
Erstberichterstatter:	Professor Dr. H. Volz
Zweitberichterstatter:	Professor Dr. L. Waldmann

I n h a l t s v e r z e i c h n i s

I. AUFGABE, METHODE UND ZIEL DER ARBEIT

II. EINE LÖSUNGSTHEORIE FÜR DREHINVARIANTE SYSTEME IN DER QUANTENMECHANIK

1. Invarianzen des Hamiltonoperators
2. Beschreibung eines Systems durch Koordinaten
 - a) Reduziertes System
 - b) Systemgebundenes Koordinatensystem
3. Transformationsverhalten der Eigenfunktionen eines drehinvarianten Hamiltonoperators
4. Entwicklung einer Lösungstheorie
 - a) Interpretation der Transformation
 - b) Erweiterung des Lösungsansatzes auf nichtgeometrische Koordinaten
5. Aufstellung der Schrödingergleichung

III. DIE ANWENDUNG DER LÖSUNGSTHEORIE AUF SYSTEME MIT ZWEI UND DREI TEILCHEN

1. Das Zwei-Teilchensystem
2. Das Drei-Teilchensystem
 - a) Hamiltonoperator
 - b) Lösungsansatz
 - c) Klassifizierung des Lösungsansatzes durch weitere Symmetrien
 - d) Differentialgleichungssystem

IV. BEHANDLUNG VON KERNEN MIT AUSSENNUKLEON UND DEFORMIERTEM KERNRUMPF

1. Diskussion des Modells von KERNAN
2. Das Drei-Teilchensystem als Modell eines Atomkerns
3. Numerische Rechnungen zum Drei-Teilchen-Kernmodell

V. ANHANG

I. AUFGABE, METHODE UND ZIEL DER ARBEIT

Die folgende Arbeit beschäftigt sich mit der quantenmechanischen Behandlung eines Systems von Massenpunkten mit gegenseitiger Wechselwirkung. Den Ausgangspunkt der Lösungstheorie bilden Koordinaten, welche einerseits die Lagen der Massenpunkte bezüglich eines mit dem System verbundenen Koordinatensystems, andererseits die Orientierung dieses Systems im Raum angeben. Die Eigenfunktionen der Schrödingergleichung werden nach den Elementen der irreduziblen Darstellung der Drehgruppe entwickelt. Diese zuerst bei E.P.WIGNER [1] zu findende Lösungstheorie wird durch Einführung von Spinkoordinaten erweitert und auf das Zwei- und Drei-Teilchensystem angewendet, wobei in beiden Systemen jeweils eines der Teilchen mit dem Spin $\frac{1}{2}$ belegt wird.

Wenn im Drei-Teilchensystem die beiden spinfreien Massenpunkte zusammen als Rumpf, das spinbehaftete Teilchen als Außennukleon gedeutet wird, bekommen wir ein Modell für Atomkerne mit deformierbarem Rumpf und Außennukleon. Zwischen diesem "Drei-Teilchen-Kernmodell" und anderen Kernmodellen ergeben sich interessante Vergleichsmöglichkeiten. Vor allem erlaubt die hier entwickelte Methode eine einfache Bestimmung der Energieeigenwerte und im Vergleich zu anderen Modellen eine sehr viel direktere Anpassung der Parameter an empirische Werte.

II. EINE LÖSUNGSTHEORIE FÜR DREHINVARIANTE SYSTEME IN DER QUANTENMECHANIK

1. Invarianzen des Hamiltonoperators

Die Bedeutung der Mechanik der Massenpunkte liegt darin, daß sich viele Naturerscheinungen auf Kräfte zurückführen lassen, die zwischen punktförmig gedachten Bausteinen der Materie wirken. Für makroskopische Systeme gelten die Gesetze der klassischen Mechanik; Systeme aus dem atomaren Bereich werden mit Methoden der Quantenmechanik beschrieben.

Die Quantenmechanik muß die klassische Mechanik als asymptotischen Grenzfall enthalten. Umgekehrt kann man aus der klassischen Mechanik durch gewisse Vorschriften die Gesetze der Quantenmechanik gewinnen. Ein solches Verfahren wird von E. SCHRÖDINGER [2] angegeben; es zeichnet sich anderen gegenüber dadurch aus, daß man den Hamiltonoperator in allgemeinen Koordinaten erhält. Die Auswahl der zur Beschreibung eines Systems geeignetsten Koordinaten kann daher ohne Rücksicht auf spezielle Übersetzungsvorschriften erfolgen.

Für die Lösung eines Problems sehr wichtige Eigenschaften sind seine Symmetrien. In der Quantenmechanik versteht man unter der Symmetrie eines Systems die Invarianz seines Hamiltonoperators gegenüber Transformationen, die bestimmte Parameter oder Koordinaten des Systems ändern. Sind die Symmetrien bekannt, so erhält man aus der Darstellungstheorie der entsprechenden Transformationsgruppen ein Ordnungsschema für die Eigenzustände, sowie Aussagen über ihre Transformationseigenschaften. Dies ist bereits möglich, bevor die Schrödingergleichung gelöst ist. Wir fragen also nach den Symmetrien eines Systems, um einen Einblick in die Lösung zu finden.

Im folgenden betrachten wir ein System von Massenpunkten, in dem innere Kräfte wirken. Dieses System denken wir uns isoliert in den homogenen und isotropen Raum gesetzt. Dann bleibt die Form des Hamiltonoperators erhalten, wenn wir das System verschieben oder drehen. Eine weitere Symmetrie ist diejenige der Invarianz des Hamiltonoperators gegenüber Spiegelung des Systems an einem beliebigen Punkt des Raumes. Diese Invarianzen des Hamiltonoperators nennen wir die "äußeren Symmetrien" des Systems.

Zu diesen kommen gegebenenfalls "innere Symmetrien", die dadurch entstehen, daß in einem System mehrere gleiche Teilchen enthalten sind. So ist zum Beispiel der Hamiltonoperator eines Atoms invariant gegenüber Austausch von Elektronen.

Die äußeren Symmetrien bieten dann die wirksamsten Klassifizierungsmöglichkeiten für die Eigenzustände, wenn ein System aus wenigen Massenpunkten aufgebaut wird. Mit solchen Systemen hat die Atom- und Kernphysik zu tun. Die Translationsinvarianz führt zu einer Zustandsmannigfaltigkeit, welche die kräftefreie Bewegung des Schwerpunktes beschreibt. Aus der Drehinvarianz ergibt sich für die Eigenzustände ein physikalisch interessantes Ordnungsschema, in dem der Begriff "Drehimpuls" eine zentrale Rolle spielt, und in welchem anschließend noch weitere Symmetrien des Systems berücksichtigt werden können.

Wie sich die Drehinvarianz bei der Lösung der Schrödingergleichung verwenden läßt, ist, verglichen mit der Translationsinvarianz, nicht so leicht zu übersehen. Es gibt daher verschiedene Lösungstheorien, deren Anwendungsbereich im allgemeinen von der Art der Kräfte bestimmt wird. Eine Lösungstheorie, welche bei beliebigen inneren Kräften anwendbar ist, findet sich bei E.P.WIGNER [4]. Physikalisch betrachtet führt sie zu einer Separation der Rotationsbewegung des Gesamtsystems, mathematisch zu einer Reduktion der Anzahl der

Variablen um drei. Wegen dieser Vorteile behandeln wir das in der Einleitung erwähnte Kernmodell nach einer derartigen Lösungstheorie. Dazu müssen wir die Überlegungen von WIGNER erweitern auf Systeme mit Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen, da in [4] nur Systeme mit spinfreien Teilchen betrachtet werden.

2. Beschreibung eines Systems durch Koordinaten

Die klassische wie die quantentheoretische Beschreibung eines Systems von N Massenpunkten geht von einer Beschreibung durch Koordinaten aus, welche die Lage der Massenpunkte kennzeichnen. Wir nennen das Inertialsystem, in welchem dies geschieht, "raumfestes System"; dieses sei ein kartesisches Koordinatensystem mit den Achsen X, Y, Z . Für die Wahl der Koordinaten gibt es grundsätzlich zwei Möglichkeiten:

a) Koordinaten, die unmittelbar auf das raumfeste System bezogen werden. Solche Koordinaten sind beispielsweise die Ortsvektoren $\underline{r}_1, \dots, \underline{r}_N$, die vom Ursprung des raumfesten Koordinatensystems zu den Massenpunkten $m_1, \dots, m_N$ zeigen.

b) Koordinaten, die zunächst den Schwerpunkt bezüglich des raumfesten XYZ-Systems und dann die Lagen der Massenpunkte relativ zu ihrem gemeinsamen Schwerpunkt festlegen. Es gilt dann: $\underline{R} + \underline{s}_i = \underline{r}_i$, $i = 1, \dots, N$; dabei bedeuten die Größen $\underline{s}_i$ Vektoren vom Schwerpunkt zu den Massenpunkten m_i und $\underline{R}$ den Ortsvektor des Schwerpunktes.

Mit welchen Koordinaten ein System am besten beschrieben wird, hängt davon ab, welcher Art die Kräfte sind, die auf die Massenpunkte wirken. Überwiegen die Kräfte, die durch äußere Felder erzeugt werden, so sind im allgemeinen die Koordinaten unter a) zweckmäßiger. Daher finden sie Anwendung für die Atomelektronen bei Zentralfeldnäherung, für die Metallelektronen im unendlich ausgedehnten Gitter, für die Nukleonen im Schalenmodell der Atomkerne u. a.

Wenn ein im Raum isoliertes System vorliegt, in dem nur innere Kräfte wirken, so bewegt sich der Schwerpunkt kräftefrei. Da Translationen des Gesamtsystems die Kräfte zwischen den Massenpunkten nicht beeinflussen, können wir Aufbau und Eigenschaften des Gebildes im Schwerpunktsystem untersuchen, in welchem die Vektoren $\underline{s}_i$ die Konfiguration angeben.

a) Reduziertes System

Wir legen den Schwerpunkt in den Ursprung des raumfesten XYZ-Systems. Die Lagen der Massenpunkte $m_1, \dots, m_N$ werden dann beschrieben durch die Vektoren $\underline{s}_1, \dots, \underline{s}_N$. Da diese der Bedingung $\sum_{i=1}^N m_i \underline{s}_i = 0$ genügen, sind sie keine unabhängigen Koordinaten, wie sie für eine Hamiltonsche Mechanik benötigt werden. Unsere erste Aufgabe wird sein, einen Satz unabhängiger Koordinaten aufzustellen. Die einfachste Möglichkeit ist die, daß man $N - 1$ Vektoren von den Vektoren $\underline{s}_1, \dots, \underline{s}_N$ auswählt. Wenn man mit diesem Satz die kinetische und potentielle Energie des Systems, T und U , berechnet, so erhält man im allgemeinen für T eine homogene quadratische Form der entsprechenden Impulse p_i , in der auch gemischte Terme $p_i \cdot p_k$ auftreten, und für U einen mehr oder weniger komplizierten Ausdruck.

Die Art des vorliegenden Gebildes wird bestimmen, welche $N - 1$ Vektoren oder welche Linearkombinationen aus diesen als unabhängige Koordinaten eingeführt werden, damit T und U Formen annehmen, die eine einfache Behandlung des Systems zulassen. Beispiele für verschiedene Möglichkeiten in dieser Richtung gibt die Mechanik der Atome und Moleküle. Verwendet man zum Beispiel bei Atomen - mit endlicher Kernmasse - wie üblich die Abstandsvektoren vom Kern zu den Elektronen als unabhängige Koordinaten, so enthält T gemischte Terme, U dagegen ist ein einfacher Ausdruck. Bei zweiatomigen Molekülen

tritt an die Stelle des Kerns der Schwerpunkt der beiden Kerne. Wie D.S.HUGHES und C.ECKART [31] gezeigt haben, kann man die gemischten Terme durch Störungsrechnung berücksichtigen, wenn das System aus "leichten" und einem "schweren" Teilchen aufgebaut ist.

Bei der Untersuchung der Atomkerne dagegen hat man mit Systemen zu tun, deren Bausteine nahezu gleiche Masse besitzen. Selbst wenn man Nukleonen modellmäßig zu kleineren Gruppen zusammenfaßt, liegen die Verhältnisse nicht so günstig wie bei Atom oder Molekül, so daß eine analoge Störungsrechnung ausscheidet.

Da die exakte Lösung einer Schrödingergleichung mit gemischten Termen im allgemeinen unmöglich ist, werden wir Koordinaten suchen, welche bewirken, daß die kinetische Energie eine reine quadratische Form bleibt. Werden solche Koordinaten gefunden, dann ist notwendigerweise das mathematische Problem in die potentielle Energie U verlagert, von der gewöhnlich die Schwierigkeiten ausgehen. Da es verhältnismäßig einfach ist, physikalisch überschaubare Näherungsmethoden für einen komplizierten Ausdruck der potentiellen Energie zu entwickeln, besteht Hoffnung, im Rahmen einer Störungsrechnung zu einer brauchbaren Lösung zu gelangen. Dies wird in der Kernphysik zutreffen, da die ungenügende Kenntnis der Kernkräfte zu mathematisch wirksameren Näherungen berechtigt.

Für ein System aus zwei Massenpunkten sind die Koordinaten, welche die von uns gestellten Bedingungen erfüllen, allgemein bekannt. Der Abstandsvektor $\underline{t}_1$ zwischen den Massenpunkten m_1 und m_2 gibt der kinetischen Energie die Form:

$$T = \frac{1}{2\mu_1} \underline{p}_1^2; \underline{p}_1 \text{ ist der zu } \underline{t}_1 \text{ kanonisch konjugierte Impuls,}$$

$$\mu_1 = m_1 m_2 / (m_1 + m_2) \text{ die sogenannte reduzierte Masse.}$$

Dieses einfache System gibt einen Hinweis darauf, wie man bei einem größeren System mit N Massenpunkten vorgehen muß.

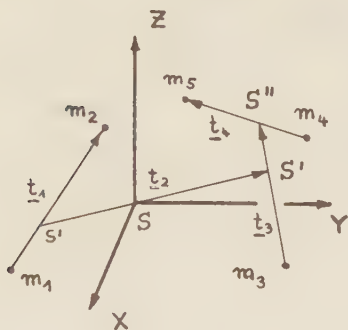


Fig. 1: Wahres System

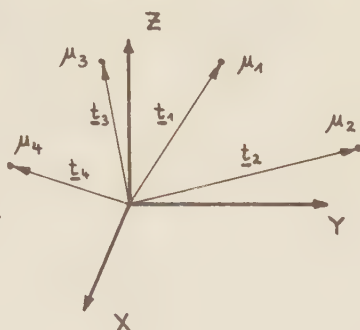


Fig. 2: Reduziertes System
(Ersatzbild)

Wir finden diese Koordinaten nach folgender Methode:
Wir gehen aus von den Massenpunkten m_1 und m_2 , deren Abstandsvektor $\underline{t}_1$ von m_1 nach m_2 gerichtet sei. Das nächste Bestimmungsstück soll der Vektor $\underline{t}_2$ sein, der vom Teilschwerpunkt s' der Massenpunkte m_1 und m_2 zum Teilschwerpunkt S' der übrigen Massenpunkte zeigt. Es kann dann so fortgefahren werden, daß wir den Massenpunkt m_3 mit dem Teilschwerpunkt S' des aus $N - 3$ Massenpunkten bestehenden Restsystems durch den Vektor $\underline{t}_3$ verbinden. Die Fortsetzung dieses Verfahrens soll uns nicht näher beschäftigen. Wichtig ist nur, daß wir auf diese Weise bei einfacher Anwendung der Gesetze der klassischen Mechanik zu einem Ausdruck für T gelangen, der formal mit demjenigen unabhängiger Einzelteilchen übereinstimmt:

$$T = \sum_{i=1}^{N-1} \frac{1}{2\mu_i} \underline{p}_i^2.$$

Das hinsichtlich der kinetischen Energie zum wahren System (Fig. 1) äquivalente System (Fig. 2), welches in unserem

Beispiel durch die Massenpunkte $\mu_1 = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$,
 $\mu_2 = \frac{(m_1 + m_2) m'}{m_1 + m_2 + m'}$, $\mu_3 = \frac{m_3 m''}{m_3 + m''}$, $\mu_4 = \frac{m_4 m_5}{m_4 + m_5}$

mit $m' = m_3 + m_4 + m_5$ und $m'' = m_4 + m_5$ aufgebaut wird, heie "reduziertes System"; die Gren μ_i nennen wir "reduzierte Massen".

Wenn man den Ausdruck fr die potentielle Energie U des Systems aufstellen will, mu klar unterschieden werden zwischen dem wahren System und dem reduzierten System, das nur ein Ersatzbild ist. Die Abstnde der Massenpunkte m_i , die in U als Variable eingehen, sind dem wahren Bild zu entnehmen; diese ergeben sich als teils einfache, teils komplizierte Linearkombinationen der Gren $\underline{t}_i$.

b) Systemgebundenes Koordinatensystem

Von den in Fig. 1 definierten Koordinaten ausgehend fhren die folgenden berlegungen einen neuen Satz von Koordinaten ein, der dazu dienen kann, die Rotationsbewegung des Gesamtsystems zu separieren.

Wrde ein starres Gebilde vorliegen, dann liee sich seine Lage in einem raumfesten Koordinatensystem XYZ allein durch die Vektoren $\underline{t}_1$ und $\underline{t}_2$ angeben. Mit diesen zwei Vektoren knnen wir ein Koordinatensystem, welches mit dem System verbunden bleibt, auch dann definieren, wenn seine innere Struktur vernderlich ist. Wir nennen dieses Koordinatensystem, das beim starren Krper als krperfestes Koordinatensystem bezeichnet wird, im allgemeinen Falle variabler Konfiguration "systemgebundenes Koordinatensystem".

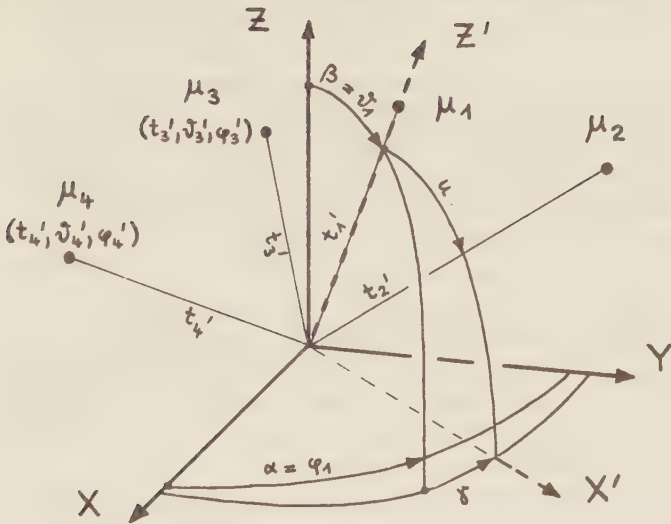


Fig. 3

Seine genaue Definition ist die folgende: Ursprung des raumfesten Koordinatensystems XYZ und Ursprung des systemgebundenen Koordinatensystems $X'Y'Z'$ sollen zusammenfallen. Die Z' -Achse des ebenfalls orthogonalen Dreibeins habe die Richtung von $\underline{t}_1$. Das neue Koordinatensystem ist eindeutig orientiert, wenn noch die Lage der X' -Achse angegeben wird. Diese soll in der Ebene der Vektoren $\underline{t}_1$ und $\underline{t}_2$ liegen, und zwar so, daß $\underline{t}_2$ eine positive X' -Komponente aufweist.

Die Lage des systemgebundenen Koordinatensystems $X'Y'Z'$ ist bestimmt durch die Richtung der Vektoren $\underline{t}_1$ und $\underline{t}_2$, die man zunächst durch ihre Azimut- und Polarwinkel, nämlich φ_1 , φ_2 und ϑ_1 , ϑ_2 , darstellen kann. Statt dieser Größen

werden im folgenden zur Orientierung des Koordinatensystems die drei Eulerschen Winkel α , β , γ eingeführt; als vierte Größe tritt hinzu der Winkel u zwischen $\underline{t}_1$ und $\underline{t}_2$. Der Übergang zu dem neuen Satz von Koordinaten ist abgeschlossen, wenn nach obiger Substitution alle weiteren Koordinaten, die zur Fixierung des Systems nötig sind, auf das X'Y'Z'-System bezogen werden. Wir verwenden für diese Koordinaten sphärische Polarkoordinaten t_i' , ϑ_i' , φ_i' (Fig. 3); die angebrachten Striche deuten an, daß die Lagen der Massenpunkte relativ zum X'Y'Z'-System gemessen werden.

Bei dieser Koordinatenwahl hat sich die Anzahl der unabhängigen Koordinaten nicht geändert. Ihr Ergebnis ist eine Teilung in die systemeigenen oder "inneren" Koordinaten, welche die Gestalt des Systems angeben, und in die "äußeren" Koordinaten, welche das Gesamtsystem orientieren und mit dem Inertialsystem verbinden.

Bei der Definition des Koordinatensystems X'Y'Z' werden zwei Massenpunkte ausgezeichnet; dies wird physikalisch dann nahegelegt, wenn sich zwei Bausteine hierzu vorteilhaft anbieten. Beispiele dafür finden sich im Bereich der Kern-, Atom- und Molekülphysik.

Die von uns dargestellte Einführung der Koordinaten $\underline{t}_1$ und $\underline{t}_2$ ist vollständig bei einem System mit drei Teilchen. Da sich von hier aus durch Erweiterung der Hamiltonoperator von größeren Systemen in einfacher Weise gewinnen läßt, steht die Untersuchung des Drei-Teilchensystems stellvertretend für Systeme mit mehreren Teilchen, was seine ausführliche Behandlung rechtfertigt.

3. Transformationsverhalten der Eigenfunktionen eines dreihinvarianten Hamiltonoperators

Es wird ein System betrachtet, das gegenüber der Gruppe der Drehungen im dreidimensionalen Raum invariant ist. Eine Definition und zugleich eine mögliche Darstellung der Gruppenelemente sind die Matrizen aller linearen Transformationen, welche die Koordinaten eines Raumpunktes beim Übergang vom Ausgangskoordinatensystem XYZ zu neuen, verdrehten Koordinatensystemen X'Y'Z' erleiden.

Bei Anwendung dieser Transformationen auf die Schrödingergleichung können diese entweder als Variablensubstitutionen oder als Beschreibung des Gebildes von verschiedenen verdrehten Koordinatensystemen aus interpretiert werden; beide Betrachtungsweisen werden im folgenden verwendet.

Die Transformationen wirken sich aus auf die Systemkoordinaten, die Wellenfunktion und den Hamiltonoperator.

a) Dem System werden neue Punkte q' im Konfigurationsraum zugeordnet gemäß $q' = R q$; die Matrix R hängt von den Eulerschen Winkeln α, β, γ ab, die eindeutig die gegenseitige Lage zweier Koordinatensysteme bestimmen.

b) Die Eigenfunktion $\Psi(q)$, die im XYZ-System definiert ist, erscheint im X'Y'Z'-System als neue Funktion $\Psi'(q')$, so daß die Gleichheit der Funktionswerte gilt: $\Psi'(q') = \Psi(q)$. Das gibt Anlaß, einen Drehoperator D_R zu definieren, der im X'Y'Z'-System aus $\Psi'(q')$ die Funktion $\Psi(q')$ erzeugt: $D_R \Psi'(q') = \Psi(q')$. Durch diese Definition des Operators D_R erhält man Übereinstimmung mit den Bezeichnungen von M.E.ROSE [4]. Es folgt dann: $\Psi(q') = D_R \Psi(q)$.

c) Der dreihinvariante Hamiltonoperator geht in die gleiche funktionale Form über: $H(p, q) \rightarrow H'(p', q') = H(p', q')$.

Aus der Schrödingergleichung ergibt sich mit den Beziehungen unter b) und c):

d) Der Hamiltonoperator ist mit dem Drehoperator vertauschbar: $[H, D_R] = 0$.

e) Die Funktionen $\Psi(q)$ und $D_R \Psi(q)$ gehören zum gleichen Eigenwert.

Punkt d) soll nicht weiter untersucht werden; er führt zu der Erhaltungsgröße "Drehimpuls". In Punkt e) knüpft die Darstellungstheorie der Gruppentheorie an; sie stellt die irreduziblen Darstellungen der Drehgruppe bereit, nach denen sich die Eigenfunktionen transformieren. Dieser Punkt sei näher erläutert.

Ein Kennzeichen drehinvarianter Systeme ist die $(2j + 1)$ -fache Entartung der Energieeigenwerte. Die $2j + 1$ Eigenfunktionen sind durch die Quantenzahlen j und μ des Gesamtdrehimpulses und seiner Z-Komponente klassifiziert. Da der Satz der Eigenfunktionen des Hamiltonoperators vollständig ist, kann jede Funktion $D_R \Psi_{j\mu}(q)$ nach den $2j + 1$ Funktionen entwickelt werden:

$$(1) \quad D_R \Psi_{j\mu}(q) = \sum_{\nu=-j}^j D_{\nu\mu}^j(R) \Psi_{j\nu}(q), \quad \mu = -j, \dots, j.$$

Die Koeffizienten $D_{\nu\mu}^j(R)$ sind die Matrixelemente der irreduziblen Darstellung der dreidimensionalen Drehgruppe. Sie lassen sich aus gruppentheoretischen Überlegungen bestimmen (E.P.WIGNER [1], M.E.ROSE [4]) und dürfen als bekannte Größen betrachtet werden.

4. Entwicklung einer Lösungstheorie

a) Interpretation der Transformation

Die Gleichungen (1) lösen wir nach den Funktionen $\psi_{j\mu}(q)$ auf. Wegen der Unitarität der Darstellungsmatrizen erhalten wir sofort:

$$(2) \quad \psi_{j\mu}(q) = \sum_{\nu=-j}^j D_{\mu\nu}^j(R)^* \psi_{j\nu}(q') \quad , \quad \mu = -j, \dots, j \quad .$$

Wir interpretieren die Gleichungen (2) im XYZ-System; das heißt, die Funktionen $\psi_{j\mu}$, sowie ihre Argumente (Lagekoordinaten der Massenpunkte) sind bezogen auf das XYZ-System. Die Koordinaten q und q' seien zwei verschiedene Punkte des Konfigurationsraumes; es wird über $2j + 1$ Werte $\psi_{j\nu}(q')$ der Stelle q' summiert. Durch die Wahl von q sind die Matrix R und damit die Koeffizienten $D_{\mu\nu}^j(R)$ bestimmt; falls j halbzahlig ist, sind die Koeffizienten bis auf das Vorzeichen festgelegt. Dann können wir bei Kenntnis der Funktionswerte bei q' den Wert $\psi_{j\mu}(q)$ der Stelle q nach den Gleichungen (2) angeben; wir können also $\psi_{j\mu}(q)$ an all den Stellen angeben, die durch die Transformationen R von q' aus erreicht werden. Um die Funktion $\psi_{j\mu}(q)$ überall berechnen zu können, zeichnen wir einen Teil des Konfigurationsraumes aus, nämlich eine Menge $\{q_0'\}$, welche die Eigenschaft hat, durch Transformationen R eindeutig auf den gesamten Konfigurationsraum abgebildet zu werden. Der ganze Konfigurationsraum zerfällt dann in zwei Teile: ein Teil, nämlich die Menge $\{q_0'\}$, heiße "Grundgebiet"; der andere Teil geht durch Transformationen R aus dem Grundgebiet hervor.

Diese Überlegung, sowie der Begriff "Grundgebiet" erscheint zum ersten Mal bei E.P.WIGNER [1].

Obige Interpretation gewinnt an Anschauung, wenn wir neben dem XYZ-System das X'Y'Z'-System in unsere Betrachtungen einbeziehen. Die Koordinaten q' gehören dann zum X'Y'Z'-System und spannen einen eigenen Konfigurationsraum auf. Wir können die Funktionen $\Psi_{j\nu}(q')$ in Gleichungen (2) als Eigenfunktionen auffassen, welche das System von Massenpunkten vom X'Y'Z'-System aus beschreiben; dann sind sie auch Eigenfunktionen zu den Drehimpulsoperatoren bezüglich der Koordinatenachsen des X'Y'Z'-Systems. Um das zu verdeutlichen, ersetzen wir das Symbol $\Psi_{j\nu}(q')$ durch $\varphi_{j\nu}(q')$, womit die Gleichungen (2) lauten:

$$(3) \quad \Psi_{j\mu}(q) = \sum_{\nu=-j}^j D_{\mu\nu}^j(R)^* \varphi_{j\nu}(q'), \quad \mu = -j, \dots, j.$$

Wir verstehen sie so: die Eigenfunktion $\Psi_{j\mu}(q)$ wird dargestellt durch eine Linearkombination von Funktionswerten $\varphi_{j\nu}(q')$ aus dem X'Y'Z'-System. Unser Ziel ist die Angabe aller Werte der Eigenfunktion $\Psi_{j\mu}(q)$ im XYZ-System. Dazu genügt es, mit derselben Begründung wie oben, die $2j + 1$ Funktionswerte $\varphi_{j\nu}(q')$ eines Teils des mit dem X'Y'Z'-System verbundenen Konfigurationsraumes, der gerade die Größe des Grundgebietes ausmacht, zu kennen. Denn alle Transformationen R oder, damit gleichbedeutend, der gesamte Wertebereich der Eulerschen Winkel sorgen dafür, daß bei Kenntnis der Funktionswerte $\varphi_{j\nu}(q_0')$ die Eigenfunktion $\Psi_{j\mu}(q)$ im ganzen zum raumfesten Koordinatensystem XYZ gehörenden Konfigurationsraum bekannt ist.

Den für uns wichtigen Teil des Konfigurationsraumes des X'Y'Z'-Systems werden wir jetzt angeben. Erinnern wir uns an die in Kapitel II, Abschnitt 2 eingeführten Koordinaten. Zu ihrer Definition ist ein systemgebundenes Koordinatensystem nötig. Identifizieren wir jenes mit obigem X'Y'Z'-System, dann stellen die dortigen Relativkoordinaten oder inneren

Koordinaten gerade die Argumente q_0' dar. Wir nennen deshalb die Funktionen $\varphi_{j\nu}(q_0')$ "innere Funktionen".

Die Eigenfunktion $\Psi_{j\mu}$ enthält dann als Argumente genau die Koordinaten, welche wir in Kap. II, Abs. 2 zur Beschreibung drehinvarianter Systeme gewählt haben. Wir kommen somit für die zu betrachtenden Systeme zu einem Lösungsansatz der Form

$$(4) \quad \Psi_{j\mu} = \sum_{\nu=-j}^j \varphi_{j\nu}(q_0') D_{\mu\nu}^j(\alpha\beta\gamma)^* .$$

Der Ansatz ist gekennzeichnet durch die Quantenzahlen j bzw. μ des Gesamtdrehimpulses bzw. seiner Z -Komponente; die Indizes $\nu = -j, \dots, j$ sind die Quantenzahlen der Z' -Komponente des Gesamtdrehimpulses. Da die noch zu bestimmenden inneren Funktionen davon unabhängig sind, wie das System im Raum orientiert ist, entspricht dieser Ansatz einer Separation in innere Bewegung und Rotationsbewegung des Gesamtsystems.

b) Erweiterung des Lösungsansatzes auf nichtgeometrische Koordinaten

Vorerst enthält unser Lösungsansatz nur die Lagekoordinaten der Massenpunkte als Argumente. Da sich die Bausteine von Systemen im atomaren Bereich wegen des Spins nicht wie einfache Massenpunkte verhalten, sind unsere bisherigen Betrachtungen noch unvollständig. Wie die zugehörigen "nichtgeometrischen" Koordinaten in Ansatz (4) zu berücksichtigen sind, zeigen die folgenden Überlegungen.

Wir gehen von dem unter a) gewonnenen Ergebnis aus, daß nämlich im Lösungsansatz (4) die Entwicklungskoeffizienten oder inneren Funktionen $\varphi_{j\nu}$ Eigenfunktionen im

$X'Y'Z'$ -System darstellen; nur der Variabilitätsbereich der Argumente ist auf den Teilraum $\{q_0\}$ eingeschränkt. Wegen unserer Interpretation erscheinen die nichtgeometrischen Koordinaten als zusätzliche Argumente der inneren Funktionen; vor allem finden sich spezielle Eigenschaften der Eigenfunktion $\psi_{j\mu}$ bei den inneren Funktionen $\varphi_{j\nu}$ wieder (Gleichung (3)). Falls zum Beispiel die Eigenfunktion ein Produkt aus Orts- und Spinfunktion ist, so gilt dies auch für die inneren Funktionen. Bei der Übertragung auf die Funktionen $\varphi_{j\nu}$ müssen wir nur beachten, wie sich solche Eigenschaften beim Übergang zum systemgebundenen Koordinatensystem transformieren.

Wenn im systemgebundenen Koordinatensystem Spinoren $\chi'(s', \sigma')$ auftreten, dann gehen diese Drehimpulseigenfunktionen aus den Spinoren $\chi(s, \sigma)$ des raumfesten Systems durch die Transformationen $\chi'(s', \sigma') = \sum_{\sigma, s} D_{\sigma\sigma'}^s(\alpha\beta\gamma) \chi(s, \sigma)$ hervor, die uns schon in Gleichungen (1) begegnet sind. In den inneren Funktionen erscheinen daher die Eulerschen Winkel als Argumente der Matricelemente $D_{\sigma\sigma'}^s$.

Da unser Lösungsansatz eine Separation der Orientierung des Systems, also der Eulerschen Winkel zum Ziel hat, müssen die Größen $D_{\sigma\sigma'}^s$, den Matricelementen $D_{\mu\nu}^{j*}$ zugeschlagen werden, so daß die Wellenfunktion $\psi_{j\mu}$ nach allen möglichen Produkten $D_{\sigma\sigma'}^s, D_{\mu\nu}^{j*}$ entwickelt wird. Einzelheiten hierzu werden zwei Anwendungen dieser Lösungstheorie auf Systeme mit einem Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen bringen.

5. Aufstellung der Schrödingergleichung

Für die kinetische und die potentielle Energie eines Systems von N Massenpunkten wurde in Kap. II, Abs. 2 erhalten:

$$T = \sum_{i=1}^{N-1} \frac{1}{2p_i} p_i^2 \quad \text{und} \quad U = U(t_1, \dots, t_{N-1}) .$$

Wird das System durch sphärische Polarkoordinaten $t_i, \vartheta_i, \varphi_i$ mit $i = 1, \dots, N-1$ beschrieben, so nehmen T und U die Formen an:

$$(5) \quad T = \sum_{i=1}^{N-1} \frac{1}{2\mu_i} [P_{t_i}^2 + \frac{1}{t_i^2} (P_{\vartheta_i}^2 + \frac{1}{\sin^2 \vartheta_i} P_{\varphi_i}^2)],$$

$$U = U(t_1, \dots, t_{N-1}, \vartheta_1, \dots, \vartheta_{N-1}, \varphi_1, \dots, \varphi_{N-1}).$$

Die Größen $p_{t_i}, p_{\vartheta_i}, p_{\varphi_i}$ sind die zu den Koordinaten $t_i, \vartheta_i, \varphi_i$ kanonisch konjugierten Impulse. Die zugehörige Schrödingergleichung ist allgemein bekannt. Man kann sie in die von uns in Kap. II, Abs. 2 eingeführten Variablen umrechnen. Einfacher ist es, auf das Variationsprinzip zurückzugreifen, aus dem die Schrödingergleichung hervorgeht [2].

Die Ausgangsgrößen für das Variationsprinzip sind kinetische und potentielle Energie des Systems, $T(q_k, p_k)$ und $U(q_k)$. Bei dieser Schreibweise stehen q_k bzw. p_k als Repräsentanten der Lagekoordinaten des Systems, bzw. der entsprechenden Impulse. Es sei

$$\oint [\hbar^2 T(q_k, \frac{\partial \psi}{\partial q_k}) + \psi^2 (U(q_k) - E)] d\tau = 0,$$

wobei $d\tau = (\Delta_p)^{\frac{1}{2}} dq_1 \dots dq_{3(N-1)}$ das Volumenelement des Konfigurationsraumes ist; Δ_p ist die Diskriminante der quadratischen Form $T(q_k, p_k)$. Die Euler-Lagrangesche Differentialgleichung dieses Variationsproblems stellt die Schrödingergleichung für die Wellenfunktion ψ dar.

In T und U sind die Variablen zu substituieren. Die potentielle Energie bereitet keine Schwierigkeiten; die kinetische Energie dagegen wäre nur sehr mühsam zu berechnen. Daher wird der Ausdruck für T nach einer Methode gewonnen, die sich durch Übersichtlichkeit und relativ geringen Rechenaufwand auszeichnet.

Betrachten wir den Ausdruck für die kinetische Energie (5), wenn das System von N Massenpunkten durch sphärische Polarkoordinaten $t_i, \vartheta_i, \varphi_i$ mit $i = 1, \dots, N-1$ beschrieben wird. Die Substitution der Radialkoordinaten t_i und der Impulse p_{t_i} ist gegeben durch: $t_i \rightarrow t_i' = t_i$ und $p_{t_i} \rightarrow p_{t_i}' = p_{t_i}$. Zur Substitution der Winkel und der entsprechenden Impulse schreiben wir zunächst für T:

$$T = \sum_{i=1}^{N-1} \frac{1}{2\mu_i} (p_{t_i}^2 + \frac{1}{t_i^2} \underline{l}_i^2) .$$

Die Größen $\underline{l}_i$ sind die Drehimpulse der Massenpunkte μ_i im reduzierten System (Fig. 2). Projizieren wir die Drehimpulse $\underline{l}_i$ auf die Achsen des systemgebundenen Koordinatensystems X'Y'Z' und bezeichnen wir die im X'Y'Z'-System erhaltenen Komponenten mit $l_{ix}', l_{iy}', l_{iz}'$, so gilt:

$l_{ix'}^2 + l_{iy'}^2 + l_{iz'}^2 = \underline{l}_i^2 = \underline{l}_1^2$. Dann lautet T:

$$(6) \quad T = \sum_{i=1}^{N-1} \frac{1}{2\mu_i} (p_{t_i'}^2 + \frac{1}{t_i'^2} \underline{l}_i'^2) .$$

Die Komponenten $l_{ix}', l_{iy}', l_{iz}'$ sind Funktionen der Winkel

$\alpha, \beta, \gamma, u, \vartheta_3', \dots, \vartheta_{N-1}', \varphi_3', \dots, \varphi_{N-1}'$ und der entsprechenden Impulse. Der mathematische Zusammenhang der

Drehimpulse mit den Winkeln und Impulsen läßt sich einfach herstellen, wenn wir die Drehimpulse als Erzeugende von infinitesimalen kanonischen Transformationen auffassen und diese aus geometrischen Überlegungen an Fig. 3 bestimmen.

Dieses Verfahren wird in Anhang A näher erläutert. Es zeigt sich, daß die Drehimpulse $\underline{l}_i'$ mit $2 < i \leq N-1$ und der Gesamt-

drehimpuls $\underline{l}' = \sum_{i=1}^{N-1} \underline{l}_i'$ einfache Ausdrücke, $\underline{l}_2'$ und vor allem

$\underline{l}_1'$ kompliziertere Größen sind. $\underline{l}_1'$ wird daher durch

$\underline{l}_1' = \underline{l}' - \sum_{i=2}^{N-1} \underline{l}_i'$ eliminiert. Wenn wir mit den auf diese

Weise ermittelten Drehimpulsen $\underline{l}_i'$ in (6) eingehen und nach

Impulsen zusammenfassen, so erhalten wir für die kinetische Energie eine homogene quadratische Form, wie sie für das Variationsprinzip benötigt wird.

Die Diskriminante Δ_p ist der quadratischen Form $T(q_k, p_k)$ zu entnehmen. Da für $N > 3$ das Ausrechnen der Diskriminante sehr aufwendig ist, gehen wir zu ihrer Bestimmung vom Volumenelement des Variationsintegrals aus. In den sphärischen Polarkoordinaten $t_i, \vartheta_i, \varphi_i$ ist

$$d\tau = \prod_{i=1}^{N-1} \mu_i^{\frac{3}{2}} t_i^2 \sin \vartheta_i dt_i d\vartheta_i d\varphi_i.$$

In den neuen Koordinaten wird dies zu:

$$d\tau' = \prod_{i=1}^{N-1} \mu_i^{\frac{3}{2}} t_i'^2 \sin \vartheta_i' \frac{\partial(\vartheta_1, \dots, \vartheta_{N-1}, \varphi_1, \dots, \varphi_{N-1})}{\partial(\alpha_1, \beta_1, \gamma_1, \vartheta_1', \dots, \vartheta_{N-1}', \varphi_1', \dots, \varphi_{N-1}')} dt_i' d\alpha \dots d\varphi_{N-1}'.$$

Die Größen $\sin \vartheta_i'$ sind noch durch die neuen Koordinaten auszudrücken. Unter Berücksichtigung der Definition der Koordinaten (Fig. 3) ergibt sich nun, daß der letzte Ausdruck in der Form $d\tau' = d\tau(1, \dots, N-1)' = d\tau(1, 2)' d\tau(3, \dots, N-1)'$ geschrieben werden kann. $d\tau(1, 2)'$ ist das Volumenelement für ein System aus drei Massenpunkten und wird aus der quadratischen Form bestimmt; $d\tau(3, \dots, N-1)'$ läßt sich aus $d\tau(3, \dots, N-1)$ über die entsprechende Funktionaldeterminante einfach berechnen.

Nach diesen Vorbereitungen können wir die Schrödingergleichung in den hier gewählten Koordinaten aufstellen. Gehen wir mit dem oben gewonnenen Lösungsansatz in die Schrödingergleichung ein, so erhalten wir ein System von Differentialgleichungen, welche über die inneren Funktionen verkoppelt sind. Wir werden Differentialgleichungssystem und Lösungsmöglichkeiten nicht allgemein diskutieren, da die Untersuchung eines Drei-Teilchensystems alle Grundzüge der Behandlung größerer Systeme zeigt.

III. DIE ANWENDUNG DER LÖSUNGSTHEORIE AUF SYSTEME MIT ZWEI UND DREI TEILCHEN

Im Zwei-Teilchensystem sei der Massenpunkt m_2 , im Drei-Teilchensystem der Massenpunkt m_3 mit einem Spin $s = \frac{1}{2}$ versehen. Das erste System kann als Modell des Wasserstoffatoms betrachtet werden, wenn die Massenpunkte m_1 und m_2 Proton und Elektron darstellen; dabei wird die Spin-Bahn-Wechselwirkung des Elektrons mitgenommen. An diesem einfachen System soll nur die Anwendung der von uns entwickelten Lösungstheorie diskutiert werden. Eine entsprechende Lösungstheorie ohne Berücksichtigung des Spins ist bei E.P. WIGNER zu finden [1].

Das zweite System wird zunächst ohne spezielle Annahmen über die Wechselwirkung der Massenpunkte behandelt. In Kapitel IV dient es dann als Modell für gewisse Atomkerne, die man sich aus Rumpf und Außennukleon aufgebaut denkt.

1. Das Zwei-Teilchensystem

Für $N = 2$ lautet der Hamiltonoperator des Systems in den von uns eingeführten Koordinaten: $H = H_0 + H_{SB}$.

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2\mu_1} \left[\frac{\partial^2}{\partial t_1'^2} + \frac{2}{t_1'} \frac{\partial}{\partial t_1'} + \frac{1}{t_1'^2} \left(\frac{\partial^2}{\partial \beta^2} + \cot \beta \frac{\partial}{\partial \beta} + \frac{1}{\sin^2 \beta} \frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} \right) \right] - \frac{e^2}{t_1'}$$

Der Term H_{SB} beschreibt die Spin-Bahn-Wechselwirkung.

Nach unserer Lösungstheorie sind die Eigenzustände des Systems primär gekennzeichnet durch die halbzahligen Quantenzahlen j und μ des Gesamtdrehimpulsoperators und seiner Z-Komponente. Der Lösungsansatz hat die Gestalt:

$$\psi_{j\mu} = \sum_{\nu=-j}^j \varphi_{j\nu}(t_1', s'=\frac{1}{2}, \sigma'=\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}) D_{\mu\nu}^j(\alpha\beta\gamma)^* .$$

Die Argumente der inneren Funktionen $\varphi_{j\nu}$ sind die Radialkoordinate t_1' , sowie die Spinkoordinaten s' und σ' . Letztere sind die Quantenzahlen des Spinoperators $\underline{S}'$ und seiner Z' -Komponente $S_{Z'}$ des systemgebundenen Koordinatensystems $X'Y'Z'$.

Im folgenden wird H_0 als ungestörter Hamiltonoperator, H_{SB} als Störoperator betrachtet. Da in H_0 der Spinoperator nicht vorkommt, sind die Funktionen $\varphi_{j\nu}$ in die Radialfunktionen $R_{j\nu}(t_1')$ und die Spinfunktionen $c_{1j\nu} \chi'(s'=\frac{1}{2}, \sigma'=\frac{1}{2}) + c_{2j\nu} \chi'(s'=\frac{1}{2}, \sigma'=-\frac{1}{2})$ zerlegbar. Die Spinoren $\chi'(\frac{1}{2}\frac{1}{2})$ und $\chi'(\frac{1}{2}-\frac{1}{2})$ sind Eigenzustände der Spinoperatoren $S_{Z'}$ und $\underline{S}'^2$; für die Konstanten $c_{1j\nu}$ und $c_{2j\nu}$ folgt aus der Normierung von $\psi_{j\nu}$: $\sum_{\nu} |c_{1j\nu}|^2 + |c_{2j\nu}|^2 = 1$.

Dann erhalten wir für die zweikomponentigen inneren Funktionen

$$\varphi_{j\nu} = c_{1j\nu} R_{j\nu}(t_1') \chi'(\frac{1}{2}\frac{1}{2}) + c_{2j\nu} R_{j\nu}(t_1') \chi'(\frac{1}{2}-\frac{1}{2}) \quad \text{als Ansatz:}$$

Wählen wir für die Spinoren des raumfesten Systems XYZ die übliche Darstellung $\chi(\frac{1}{2}\frac{1}{2}) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ und $\chi(\frac{1}{2}-\frac{1}{2}) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$, und schreiben wir $R_{1j\nu}$ bzw. $R_{2j\nu}$ für $c_{1j\nu} R_{j\nu}$ bzw. $c_{2j\nu} R_{j\nu}$, so nehmen die inneren Funktionen die Gestalt an:

$$\varphi_{j\nu} = R_{1j\nu}(t_1') \begin{pmatrix} D_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}(\alpha\beta\gamma) \\ D_{-\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}(\alpha\beta\gamma) \end{pmatrix} + R_{2j\nu}(t_1') \begin{pmatrix} D_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}(\alpha\beta\gamma) \\ D_{-\frac{1}{2}\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}(\alpha\beta\gamma) \end{pmatrix}.$$

Die Anzahl der $2(2j+1)$ unbekannten Funktionen $R_{1j\nu}$, $R_{2j\nu}$ läßt sich reduzieren, indem wir zwei Eigenschaften des Hamiltonoperators ausnützen.

a) Der Hamiltonoperator H_0 enthält nur die beiden Eulerschen Winkel α und β ; daher darf die Wellenfunktion vom Winkel γ nicht abhängen. Betrachten wir die Produkte

$$D_{\sigma\sigma'}^{\frac{1}{2}}(\alpha\beta\gamma) D_{\mu\nu}^j(\alpha\beta\gamma)^* = e^{-i\sigma\alpha} d_{\sigma\sigma'}^{\frac{1}{2}}(\beta) e^{-i\sigma'\gamma} e^{i\mu\alpha} d_{\mu\nu}^j(\beta) e^{i\nu\gamma}$$

mit $\sigma, \sigma' = -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$ und $\mu, \nu = -j, \dots, j$, so ist dies nur erfüllbar, wenn für die Radialfunktionen $R_{1j\nu}, R_{2j\nu}$ gefordert wird:

$$R_{1j\nu} = 0 \text{ für alle } \nu \neq \frac{1}{2}, R_{2j\nu} = 0 \text{ für alle } \nu \neq -\frac{1}{2}.$$

Für die Eigenfunktion $\psi_{j\mu}$ folgt dann:

$$(7) \quad \psi_{j\mu} = R_{1j\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} D_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}\frac{1}{2}} \\ D_{-\frac{1}{2}\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}\frac{1}{2}} \end{pmatrix} D_{\mu\frac{1}{2}}^j * + R_{2j-\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} D_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} \\ D_{-\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} \end{pmatrix} D_{\mu-\frac{1}{2}}^j *.$$

b) Der Hamiltonoperator H_0 ist invariant gegenüber Spiegelung des Systems am Koordinatenursprung. Daher können die Eigenzustände $\psi_{j\mu}$ entsprechend den Eigenwerten $\pi = \pm 1$ des Spiegelungsoperators I klassifiziert werden. Wir bezeichnen mit $\psi_{j\mu}^+$ den Eigenzustand mit gerader Parität, mit $\psi_{j\mu}^-$ denjenigen mit ungerader Parität. Die Zustände ungleicher Parität unterscheiden sich ^{möglicherweise} in den Radialfunktionen: bei gerader Parität liegen die Funktionen $R_{1j\frac{1}{2}}^+$ und $R_{2j-\frac{1}{2}}^+$ vor, bei ungerader Parität die Funktionen $R_{1j\frac{1}{2}}^-$ und $R_{2j-\frac{1}{2}}^-$.

Die Spiegelung des Systems ist definiert durch die Koordinatentransformation: $t_i' \rightarrow \bar{t}_i' = t_i'; \alpha \rightarrow \bar{\alpha} = \pi + \alpha; \beta \rightarrow \bar{\beta} = \pi - \beta$.

Die Spinoren $\chi(\frac{1}{2}\frac{1}{2}) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ und $\chi(\frac{1}{2}-\frac{1}{2}) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ gehen bei dieser Operation in sich selbst über. Mit der Beziehung

$$d_{\mu\nu}^j(\pi - \beta) = (-1)^{j+\mu} d_{\mu-\nu}^j(\beta)$$

Transformation wesentlichen Bestandteile von (7):

$$\begin{aligned} D_{\sigma\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}}(\pi + \alpha, \pi - \beta, \gamma) D_{\mu\frac{1}{2}}^j(\pi + \alpha, \pi - \beta, \gamma)^* &= (-1)^{j-\frac{1}{2}} D_{\sigma-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}}(\alpha\beta\gamma) D_{\mu-\frac{1}{2}}^j(\alpha\beta\gamma)^*, \\ D_{\sigma-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}}(\pi + \alpha, \pi - \beta, \gamma) D_{\mu-\frac{1}{2}}^j(\pi + \alpha, \pi - \beta, \gamma)^* &= (-1)^{j-\frac{1}{2}} D_{\sigma\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}}(\alpha\beta\gamma) D_{\mu\frac{1}{2}}^j(\alpha\beta\gamma)^*. \end{aligned}$$

Mit diesen Ergebnissen liefert die Anwendung des Spiegelungsoperators I auf $\psi_{j\mu}^\pm$:

$$I \psi_{j\mu}^\pm = (-1)^{j-\frac{1}{2}} (R_{2j-\frac{1}{2}}^\pm \chi'(\frac{1}{2}\frac{1}{2}) D_{\mu\frac{1}{2}}^j * + R_{1j\frac{1}{2}}^\pm \chi'(\frac{1}{2}-\frac{1}{2}) D_{\mu-\frac{1}{2}}^j *).$$

Diese Gleichung zeigt, welcher Bedingung die Radialfunktionen genügen müssen, damit der Lösungsansatz Eigenzustände definierter Parität darstellt; es muß sein:

$$R_{1j\frac{1}{2}}^{\pm}(t_1') = \pm (-1)^{j-\frac{1}{2}} R_{2j-\frac{1}{2}}^{\pm}(t_1').$$

Der Lösungsansatz mit gerader bzw. ungerader Parität lautet somit:

$$(7') \quad \psi_{j\mu}^{\pm} = R_{1j\frac{1}{2}}^{\pm} [\chi'(\frac{1}{2}\frac{1}{2}) D_{\mu\frac{1}{2}}^j]^* \pm (-1)^{j-\frac{1}{2}} \chi'(\frac{1}{2}-\frac{1}{2}) D_{\mu-\frac{1}{2}}^j]^* .$$

Als nächstes berücksichtigen wir im Lösungsansatz eine weitere Eigenschaft des Hamiltonoperators H_0 . Der Ausdruck in den runden Klammern von H_0 ist bis auf den Faktor $-\hbar^2$ gleich dem Bahndrehimpulsoperator $\underline{L}^2$ des Massenpunktes μ_1 , den man gewöhnlich aus den Komponenten L_x, L_y, L_z bezüglich der Achsen des raumfesten Koordinatensystems XYZ gewinnt. Das systemgebundene Koordinatensystem X'Y'Z' bietet die Möglichkeit, den Bahndrehimpulsoperator des Systems durch die Komponenten $L_{x'}, L_{y'}, L_{z'}$ bezüglich der Achsen X', Y', Z' darzustellen: $\underline{L}'^2 = L_{x'}'^2 + L_{y'}'^2 + L_{z'}'^2$.

$$(8) \quad \begin{aligned} L_{x'} &= \frac{\hbar}{i} \left(-\frac{\cos\gamma}{\sin\beta} \frac{\partial}{\partial\alpha} + \sin\gamma \frac{\partial}{\partial\beta} + \cot\beta \cos\gamma \frac{\partial}{\partial\gamma} \right) \\ L_{y'} &= \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\sin\gamma}{\sin\beta} \frac{\partial}{\partial\alpha} + \cos\gamma \frac{\partial}{\partial\beta} - \cot\beta \sin\gamma \frac{\partial}{\partial\gamma} \right) \\ L_{z'} &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial\gamma} \\ \underline{L}'^2 &= -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial\beta^2} + \cot\beta \frac{\partial}{\partial\beta} + \frac{1}{\sin^2\beta} \left(\frac{\partial^2}{\partial\alpha^2} - 2\cos\beta \frac{\partial^2}{\partial\alpha\partial\gamma} + \frac{\partial^2}{\partial\gamma^2} \right) \right) \end{aligned}$$

Die Komponenten von $\underline{L}'$ erfüllen die anomalen Vertauschungsrelationen: $L_{x'}' L_{y'}' - L_{y'}' L_{x'}' = \frac{\hbar}{i} L_{z'}'$ und zyklisch. Beachten wir, daß $\psi_{j\mu}^{\pm}$ die Variable γ nicht enthält, so folgt für H_0 :

$$(9) \quad H_0 = -\frac{\hbar^2}{2\mu_1} \left(\frac{\partial^2}{\partial t_1'^2} + \frac{2}{t_1'} \frac{\partial}{\partial t_1'} \right) + \frac{1}{2\mu_1 t_1'^2} \underline{L}'^2 - \frac{e^2}{t_1'} .$$

Die Bahndrehimpulsoperatoren (8) sind für die Lösungstheorie von großer Bedeutung. Auch bei einem System mit $N > 2$ Massenpunkten lassen sie sich in den Hamiltonoperator so einführen, daß dieser die äußeren Koordinaten nur in Gestalt dieser Operatoren enthält. Bei dieser Schreibweise des Hamiltonoperators ist die Separation der inneren Funktionen immer möglich.

Der Hamiltonoperator H_0 ist mit dem Operator $\underline{L}'^2$ vertauschbar. Daher kann der Lösungsansatz (7) noch so gewählt werden, daß er Eigenzustand von $\underline{L}'^2$ ist und zum Eigenwert $\hbar^2 \ell(\ell+1)$ gehört.

Die Darstellungsmatrizen der Drehgruppe $\mathcal{D}_{\mu\nu}^j(\alpha\beta\gamma)$ haben auch eine physikalische Bedeutung; sie sind die Eigenfunktionen des symmetrischen Kreisels. Nach [4], [5] gelten für diese die Beziehungen

$$\begin{aligned} \underline{L}'^2 \mathcal{D}_{\mu\nu}^{j*} &= \hbar^2 j(j+1) \mathcal{D}_{\mu\nu}^{j*}, \\ (10) \quad \underline{L}'_{\pm} \mathcal{D}_{\mu\nu}^{j*} &= \hbar \sqrt{(j \pm \nu)(j \mp \nu + 1)} \mathcal{D}_{\mu, \nu \mp 1}^{j*} \text{ mit } \underline{L}'_{\pm} = \underline{L}'_x \pm i \underline{L}'_y, \\ \underline{L}'_z \mathcal{D}_{\mu\nu}^{j*} &= \hbar \nu \mathcal{D}_{\mu\nu}^{j*}. \end{aligned}$$

Bei der Anwendung von $\underline{L}'^2$ auf $\psi_{j\mu}^{\pm}$ kommen Ausdrücke der Art $\underline{L}'^2 (\mathcal{D}_{\sigma\sigma}^{\frac{1}{2}}, \mathcal{D}_{\mu\nu}^{j*})$ vor; zu ihrer Berechnung wird der Operator $\underline{L}'^2$ zerlegt in $\underline{L}'^2 = \frac{1}{2} (\underline{L}'_+ \underline{L}'_- + \underline{L}'_- \underline{L}'_+) + \underline{L}'_z^2$. Mit (10) ergibt sich dann:

$$(11) \quad \underline{L}'^2 \psi_{j\mu}^{\pm} = \hbar^2 \left\{ (j - \frac{1}{2})(j + \frac{1}{2}) + (j + \frac{1}{2}) [1 \mp (-1)^{j-\frac{1}{2}}] \right\} \psi_{j\mu}^{\pm};$$

d.h. $\psi_{j\mu}^{\pm}$ ist Eigenzustand zu $\underline{L}'^2$.

Da j halbzahlrig ist, können vier Fälle unterschieden werden:

gerade Parität ($\pi = +1$) und $j = \ell + \frac{1}{2}$ ($\ell = 0, 2, 4, \dots$)

gerade Parität ($\pi = +1$) und $j = \ell - \frac{1}{2}$ ($\ell = 2, 4, 6, \dots$)

ungerade Parität ($\pi = -1$) und $j = \ell + \frac{1}{2}$ ($\ell = 1, 3, 5, \dots$)

ungerade Parität ($\pi = -1$) und $j = \ell - \frac{1}{2}$ ($\ell = 1, 3, 5, \dots$)

Als Eigenwerte erhält man immer $\hbar^2 \ell(\ell + 1)$; die Parität π des Lösungsansatzes wird also durch die Quantenzahl des Bahndrehimpulsoperators bestimmt: $\pi = (-1)^\ell$. Umgekehrt ist bei vorgegebenen j und π die Quantenzahl ℓ eindeutig festgelegt. Es erscheinen also bekannte Ergebnisse unter einem ganz neuen Aspekt.

Wird der Lösungsansatz $\psi_{j\pi}^\pm$ mit gerader bzw. ungerader Parität in die Schrödingergleichung eingesetzt, so folgt unmittelbar für die Radialfunktionen: $R_{1j\frac{1}{2}}^+ = R_{1j\frac{1}{2}}^-$; zu ihrer Bestimmung bleibt eine Eigenwertgleichung übrig, deren Lösungen die Laguerreschen Polynome sind.

Schließlich soll noch die Spin-Bahn-Wechselwirkung des Teilchens m_2 als Störung berücksichtigt werden. Wir setzen sie wie üblich in der Form eines Skalarproduktes an, also $H_{SB} = C \underline{L} \cdot \underline{S}$, wobei im Falle des Wasserstoffatoms

$C = \frac{e^2}{2\mu_1^2 c^2} \frac{1}{r^3}$ ist. Für die Anwendung unserer Lösungstheorie ist die Einführung der Drehimpulsoperatoren $\underline{L}'$ und $\underline{S}'$ bezüglich der Achsen des systemgebundenen Koordinatensystems notwendig. $\underline{L}'$ ist in Gleichungen (8) gegeben, $\underline{S}'$ erhält man durch Transformation der Paulischen Spinmatrizen [4]:

$$(12) \quad S_x' = \frac{\hbar}{2} e^{\mp i\gamma} \begin{pmatrix} -\sin\beta & \pm e^{-i\alpha}(1 \pm \cos\beta) \\ \mp e^{i\alpha}(1 \mp \cos\beta) & \sin\beta \end{pmatrix},$$

$$S_z' = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos\beta & e^{-i\alpha}\sin\beta \\ e^{i\alpha}\sin\beta & -\cos\beta \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad S_\pm' = S_x' \pm i S_y'$$

Man sieht aber, daß die Operatoren $\underline{L}'$ und $\underline{S}'$ im Gegensatz zu $\underline{L}$ und $\underline{S}$ nicht miteinander vertauschbar sind. Durch Verifizieren bestätigt man, daß $\underline{S}' \cdot \underline{L}' = \underline{L} \cdot \underline{S}$ ist, wobei auf der linken Seite die Reihenfolge der Faktoren zu beachten ist.

Die Ergänzung von H_0 durch den Term H_{SB} ändert die Symmetrieeigenschaften des Systems nicht; die Klassifizierung der Eigenfunktion $\psi_{j\mu}^{\pm}$ nach den Quantenzahlen j, μ, π bleibt also erhalten. Nach der gleichen Methode wie in (11) wird nun $H_{SB} \psi_{j\mu}^{\pm}$ berechnet. Das Ergebnis lautet:

$$(12') \quad H_{SB} \psi_{j\mu}^{\pm} = C \frac{\hbar^2}{2} \left\{ -1 \pm (-1)^{j-\frac{1}{2}} (j+\frac{1}{2}) \right\} \psi_{j\mu}^{\pm}.$$

Ersetzt man in (12') die Zeichen $\pm$ durch $(-1)^{\ell}$, so folgt für den Erwartungswert des Operators H_{SB} :

$$\langle H_{SB} \rangle = \langle C \rangle \frac{\hbar^2}{2} \begin{cases} \ell & \text{für } j = \ell + \frac{1}{2} \\ -(\ell + 1) & \text{für } j = \ell - \frac{1}{2} \end{cases}.$$

Unsere Lösungstheorie liefert also die gleichen Ergebnisse wie die allgemein übliche Behandlung des Zwei-Teilchensystems.

Nach dieser Vorbereitung wenden wir uns der Lösung der Schrödingergleichung des Drei-Teilchensystems zu.

2. Das Drei-Teilchensystem

a) Hamiltonoperator

Für $N = 3$ sind in Fig. 3 alle zur Beschreibung dieses Systems notwendigen Koordinaten definiert. Zur deutlicheren Unterscheidung der Radialkoordinaten ersetzen wir t_1' durch ϱ und t_2' durch τ . Über die Kräfte zwischen den Massenpunkten werden vorerst keine speziellen Annahmen gemacht, die potentielle Energie des Systems U ist also eine noch vorgebbare Funktion der inneren Koordinaten ϱ, τ, u . Der Hamiltonoperator kann nach der in Kap. II, Abs. 5 beschriebenen Methode gewonnen werden. Ausdrücke, welche die äußeren Koordinaten, also die Eulerschen Winkel, enthalten, lassen sich durch die Operatoren des Gesamtbahndrehimpulses im systemgebundenen Koordinatensystem substituieren. Der Hamiltonoperator H_0 des Drei-Teilchensystems [6], [7] hat dann folgende Gestalt:

$$\begin{aligned}
 H_0 = & -\frac{\hbar^2}{2\mu_1\varrho^2}[\vartheta] - \frac{\hbar^2}{2\mu_2\tau^2}[\tau] - \left(\frac{1}{2\mu_1\varrho^2} + \frac{1}{2\mu_2\tau^2}\right)\left(\hbar^2[u] - \frac{1}{\sin^2 u}L_z'^2\right) + \\
 & + \frac{1}{2\mu_1\varrho^2}(L_+'^2 - 2L_z'^2) + \\
 & + \frac{1}{2\mu_1\varrho^2}(L_+'[\hbar\frac{\partial}{\partial u} + \cot u L_z'] + L_-'[-\hbar\frac{\partial}{\partial u} + \cot u L_z']) + \\
 & + U(\varrho, \tau, u) .
 \end{aligned}
 \tag{13}$$

Dabei bedeuten: $[\vartheta] = \frac{\partial}{\partial \vartheta}(\vartheta^2 \frac{\partial}{\partial \vartheta})$, $[\tau] = \frac{\partial}{\partial \tau}(\tau^2 \frac{\partial}{\partial \tau})$,
 $[u] = \frac{1}{\sin u} \frac{\partial}{\partial u}(\sin u \frac{\partial}{\partial u})$.

An dieser Stelle seien drei weitere Abkürzungen vermerkt, die erst in (23) und (24) verwendet werden:

$$(14) \quad A = \frac{\hbar^2}{2\mu_1\varrho^2}, \quad B = \frac{\hbar^2}{2\mu_2\tau^2}, \quad A+B = \overline{D}.$$

Der Hamiltonoperator H_0 soll auch hier durch einen Störterm $H_{SB} = C \underline{L}_2 \cdot \underline{S}$ erweitert werden, der die Spin-Bahn-Wechselwirkung des Teilchens m_3 beschreiben soll; darin ist C eine Konstante, $\underline{L}_2$ der Bahndrehimpulsoperator, $\underline{S}$ der Spinoperator des Massenpunktes μ_2 im raumfesten Koordinatensystem. Analog zu den Überlegungen in Kap. III, Abs. 1 müssen die Drehimpulsoperatoren $\underline{L}_2'$ und $\underline{S}'$ im systemgebundenen Koordinatensystem eingeführt werden. Die Komponenten von $\underline{L}_2'$ *) ergeben sich aus infinitesimalen Drehungen um die Achsen des systemgebundenen Koordinatensystems zu

$$(15) \quad L_{2x}' = -\frac{\hbar}{i} \cot u \frac{\partial}{\partial x}, \quad L_{2y}' = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial u}, \quad L_{2z}' = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi};$$

die Komponenten von $\underline{S}'$ ergeben sich wie in (12). Man verifiziert, daß auch hier der Störterm die Form $H_{SB} = C \underline{S}' \cdot \underline{L}_2'$ annimmt, wobei wiederum die Reihenfolge der Faktoren zu beachten ist.

(16) Der gesamte Hamiltonoperator ist also: $H = H_0 + H_{SB}$.

b) Lösungsansatz

Der Lösungsansatz für das durch (16) gegebene System lautet:

$$(17) \quad \psi_{j\mu} = \sum_{\nu=-j}^j \varphi_{j\nu}(\vartheta, \tau, u; s'=\frac{1}{2}, \sigma'=\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}) D_{\mu\nu}^j(\alpha\beta\gamma)^*.$$

*) Eine genauere Diskussion dieser Operatoren findet man bei H. RUDER [6] und [7].

Im ungestörten Fall, d. h. $H_{SB} = 0$ lassen sich die inneren Funktionen in der Form schreiben:

$$(18) \quad \varphi_{j\nu} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(G_{1\nu}^j(\vartheta\tau u) \chi'(\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}) + G_{2\nu}^j(\vartheta\tau u) \chi'(\tfrac{1}{2}-\tfrac{1}{2}) \right).$$

$G_{1\nu}^j$ und $G_{2\nu}^j$ sind Funktionen der inneren Koordinaten ϑ, τ, u , die zweikomponentigen Größen $\chi'(\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2})$ und $\chi'(\tfrac{1}{2}-\tfrac{1}{2})$ Funktionen der Eulerschen Winkel α, β, γ .

c) Klassifizierung des Lösungsansatzes durch weitere Symmetrien

Der Hamiltonoperator ist invariant gegenüber Spiegelung des Systems am Koordinatenursprung. Folglich gibt es Lösungsansätze mit gerader bzw. ungerader Parität, die mit $\psi_{j\mu}^+$ bzw. $\psi_{j\mu}^-$ bezeichnet seien. Bei Spiegelung bleiben die inneren Koordinaten unverändert, die äußeren Koordinaten α, β, γ gehen über in $\pi + \alpha, \pi - \beta, \pi - \gamma$; die Spinkoordinaten verhalten sich wie in Kap. III, Abs. 1. Damit der Lösungsansatz Eigenzustand des Spiegeloperators I ist, müssen die inneren Funktionen $G_{1\nu}^j$ und $G_{2\nu}^j$ die folgenden $(2j+1)$ Gleichungen erfüllen:

$$(19) \quad G_{2-\nu}^{j\pm} = \pm (-1)^{j-\nu} G_{1\nu}^{j\pm}, \quad \nu = -j, \dots, j.$$

Damit läßt sich die Anzahl der $2(2j+1)$ inneren Funktionen auf $2j+1$ reduzieren. Beim Einsetzen von (18) in (17) unter Berücksichtigung von (19) erweist es sich als vorteilhaft, folgende zweikomponentigen Funktionen einzuführen, die nur von den äußeren Koordinaten abhängen:

$$(20) \quad \begin{aligned} \psi_{1\mu\nu}^{j\pm} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \chi'(\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}) D_{\mu\nu}^{j*} \pm (-1)^{j-\nu} \chi'(\tfrac{1}{2}-\tfrac{1}{2}) D_{\mu-\nu}^{j*} \right\} \\ \psi_{2\mu\nu}^{j\pm} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \chi'(\tfrac{1}{2}-\tfrac{1}{2}) D_{\mu\nu}^{j*} \mp (-1)^{j-\nu} \chi'(\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}) D_{\mu-\nu}^{j*} \right\} \\ &\quad \nu = \tfrac{1}{2}, \dots, j. \end{aligned}$$

Man erhält dann als Lösungsansatz mit gerader bzw. ungerader Parität:

$$(21) \quad \psi_{j\mu}^{\pm} = \sum_{\nu=\frac{1}{2}}^j (G_{1\nu}^{j\pm} \gamma_{j1\nu}^{j\pm} + G_{2\nu}^{j\pm} \gamma_{j2\nu}^{j\pm}) .$$

Eine weitere Symmetrie des Systems sei die Invarianz seines Hamiltonoperators gegenüber A u s t a u s c h d e r T e i l c h e n 1 und 2. Dementsprechend läßt sich die Lösungsmannigfaltigkeit (21) in symmetrische (s) und antisymmetrische (a) Lösungen einteilen.

Die Austauschoperation E_{12} bedeutet: $\varrho \rightarrow \varrho, \tau \rightarrow \tau, u \rightarrow \pi - u, \alpha \rightarrow \pi + \alpha, \beta \rightarrow \pi - \beta, \gamma \rightarrow 2\pi - \gamma$. Aus den Symmetrieforderungen für den Lösungsansatz (21) ergeben sich damit folgende Beziehungen

$$(22) \quad \begin{aligned} G_{1\nu}^{j\pm s}(\varrho\tau\pi-u) &= \pm (-1)^{\nu-\frac{1}{2}} G_{1\nu}^{j\pm s}(\varrho\tau u), & G_{2\nu}^{j\pm s}(\varrho\tau\pi-u) &= \mp (-1)^{\nu-\frac{1}{2}} G_{2\nu}^{j\pm s}(\varrho\tau u), \\ G_{1\nu}^{j\pm a}(\varrho\tau\pi-u) &= \mp (-1)^{\nu-\frac{1}{2}} G_{1\nu}^{j\pm a}(\varrho\tau u), & G_{2\nu}^{j\pm a}(\varrho\tau\pi-u) &= \pm (-1)^{\nu-\frac{1}{2}} G_{2\nu}^{j\pm a}(\varrho\tau u), \end{aligned}$$

auf die wir in Kapitel IV zurückkommen.

d) Differentialgleichungssystem

Der Lösungsansatz ist nach all den Symmetrien klassifiziert, welche das in (16) definierte Drei-Teilchensystem zeigt. Der in (21) erhaltene Ansatz wird in die Schrödingergleichung eingesetzt: $H \psi_{j\mu}^{\pm} = E \psi_{j\mu}^{\pm}$. Die Ergebnisse der Anwendung von H auf die einzelnen Glieder von $\psi_{j\mu}^{\pm}$ sind in Anhang B zusammengestellt.

Da die $2j+1$ Funktionen $\gamma_{j1\nu}^{j\pm}, \gamma_{j2\nu}^{j\pm}$ linear unabhängige Funktionen sind, müssen die auftretenden Koeffizienten

verschwinden. Man erhält so ein System von $2j+1$ verkoppelten partiellen Differentialgleichungen für die inneren Funktionen $G_{1\nu}^{j\pm}$, $G_{2\nu}^{j\pm}$:

$$\begin{aligned}
 & -A \sqrt{(j-\nu+1)(j+\nu)} \left[\frac{\partial}{\partial u} - (\nu - \frac{3}{2}) \cot u \right] G_{1\nu-1}^{j\pm} - \\
 & -A \sqrt{(j-\nu+1)(j+\nu)} G_{2\nu-1}^{j\pm} + \\
 & + \left\{ -A[\xi] - B[\tau] - \bar{D} \left([u] - \frac{(\nu - \frac{1}{2})^2}{\sin^2 u} \right) + A \left[j(j+1) + \frac{3}{4} - \nu - 2(\nu - \frac{1}{2})^2 \right] + \right. \\
 & \quad \left. + C \frac{k^2}{2} (\nu - \frac{1}{2}) + U - E \right\} G_{1\nu}^{j\pm} + \\
 & + (C \frac{k^2}{2} + A) \left[-\frac{\partial}{\partial u} - (\nu + \frac{1}{2}) \cot u \right] G_{2\nu}^{j\pm} - \\
 & -A \sqrt{(j-\nu)(j+\nu+1)} \left[-\frac{\partial}{\partial u} - (\nu + \frac{1}{2}) \cot u \right] G_{1\nu+1}^{j\pm} = 0
 \end{aligned}$$

(23)

$$\begin{aligned}
 & -A \sqrt{(j-\nu+1)(j+\nu)} \left[\frac{\partial}{\partial u} - (\nu - \frac{1}{2}) \cot u \right] G_{2\nu-1}^{j\pm} + \\
 & + (C \frac{k^2}{2} + A) \left[\frac{\partial}{\partial u} - (\nu - \frac{1}{2}) \cot u \right] G_{1\nu}^{j\pm} + \\
 & + \left\{ -A[\xi] - B[\tau] - \bar{D} \left([u] - \frac{(\nu + \frac{1}{2})^2}{\sin^2 u} \right) + A \left[j(j+1) + \frac{3}{4} + \nu - 2(\nu + \frac{1}{2})^2 \right] - \right. \\
 & \quad \left. - C \frac{k^2}{2} (\nu + \frac{1}{2}) + U - E \right\} G_{2\nu}^{j\pm} - \\
 & -A \sqrt{(j-\nu)(j+\nu+1)} G_{1\nu+1}^{j\pm} - \\
 & -A \sqrt{(j-\nu)(j+\nu+1)} \left[-\frac{\partial}{\partial u} - (\nu + \frac{3}{2}) \cot u \right] G_{2\nu+1}^{j\pm} = 0
 \end{aligned}$$

$$\nu = \frac{3}{2}, \dots, j.$$

Die Größen A , B , $\bar{D}$ sind bereits in (14) definiert worden.

Die ersten beiden Zeilen des Differentialgleichungssystems ($\nu = \frac{1}{2}$) sind in (23) nicht enthalten; sie lauten:

$$\begin{aligned} & \{-A[\xi] - B[\tau] - \bar{D}[u] + A(j+\frac{1}{2})[j+\frac{1}{2} \mp (-1)^{j-\frac{1}{2}}] + U - E\} G_{1\frac{1}{2}}^{j\pm} + \\ & + \{C\frac{\hbar^2}{2} + A[j+\frac{1}{2} \mp (-1)^{j-\frac{1}{2}}][\mp (-1)^{j-\frac{1}{2}}]\} [-\frac{\partial}{\partial u} - \omega t u] G_{2\frac{1}{2}}^{j\pm} - \\ & - A \sqrt{(j-\frac{1}{2})(j+\frac{3}{2})} [-\frac{\partial}{\partial u} - \omega t u] G_{1\frac{3}{2}}^{j\pm} = 0 \end{aligned}$$

(24)

$$\begin{aligned} & \{C\frac{\hbar^2}{2} + A[j+\frac{1}{2} \mp (-1)^{j-\frac{1}{2}}][\mp (-1)^{j-\frac{1}{2}}]\} \frac{\partial}{\partial u} G_{1\frac{1}{2}}^{j\pm} + \\ & + \{-A[\xi] - B[\tau] - \bar{D}([u] - \frac{1}{\sin^2 u}) + A[j(j+1) - \frac{3}{4}] - C\frac{\hbar^2}{2} + U - E\} G_{2\frac{1}{2}}^{j\pm} - \\ & - A \sqrt{(j-\frac{1}{2})(j+\frac{3}{2})} G_{1\frac{3}{2}}^{j\pm} - \\ & - A \sqrt{(j-\frac{1}{2})(j+\frac{3}{2})} [-\frac{\partial}{\partial u} - 2\omega t u] G_{2\frac{3}{2}}^{j\pm} = 0 \end{aligned}$$

Da in die Differentialgleichungen (24) die Parität des Lösungsansatzes $\psi_{j\mu}^{\pm}$ eingeht, unterscheidet sich das Differentialgleichungssystem der Eigenzustände gerader Parität von demjenigen der Eigenzustände ungerader Parität.

Die Lösung der Schrödingergleichung des Drei-Teilchensystems ist damit auf die Lösung dieser zwei Differentialgleichungssysteme zurückgeführt. Eine weitere Reduktion der Lösung ist erst möglich, wenn nähere Annahmen über die potentielle Energie des Systems gemacht werden. Dies geschieht in Kapitel IV, in dem das Drei-Teilchensystem als Modell für eine bestimmte Gruppe von Atomkernen verwendet wird; dabei ergeben sich interessante Vergleiche mit anderen Kernmodellen.

IV. BEHANDLUNG VON KERNEN MIT AUSSENNUKLEON UND DEFORMIERTEM KERNRUMPF

In ihrer Arbeit über das kollektive Kernmodell diskutieren A. BOHR und B. R. MOTTELSON [8] wenigstens qualitativ auch die Bindung eines einzelnen Nukleons an den deformierten Kernrumpf, wobei noch keine bestimmten Rumpf-Teilchen-Potentiale eingeführt werden. Diese werden von D. L. HILL und J. A. WHEELER [9], S. A. MOSZKOWSKI [40], S. G. NILSSON [41] u. a. untersucht; es wird immer ein raumfestes Potential betrachtet, was einem unendlich schweren Kern entspricht.

NILSSON führt eine Schalenmodellrechnung durch mit axial-symmetrisch deformiertem Oszillatorpotential, Spin-Bahn-Wechselwirkung und einem Term, der die Interpolation zwischen Oszillator- und Kastenpotential simuliert. Das von ihm verwendete Potential übernimmt A. K. KERMAN [42] für die quantitative Behandlung eines Modells aus Rumpf und Außenteilchen, wobei der das Potential erzeugende Rumpf nicht mehr unendlich schwer angenommen wurde, so daß eine Wechselwirkung zwischen Teilchen- und Rumpfbewegung auftritt.

1. Diskussion des Modells von KERMAN

Der Hamiltonoperator von KERMAN lautet: $H = H_R + H_p + H_c$ mit

$$\begin{aligned}
 H_R &= \frac{\hbar^2}{2\mathcal{I}_0} (\mathcal{I}^2 - \mathcal{I}_3^2 - j_3^2) + \frac{\hbar^2}{2\mathcal{I}_3} (\mathcal{I}_3^2 - j_3^2) , \\
 (25) \quad H_p &= \left\{ \frac{p^2}{2m} + V(\tau, \underline{\ell}, \underline{s}) \right\} + \frac{\hbar^2}{2\mathcal{I}_0} \underline{j}^2 , \\
 H_c &= -\frac{\hbar^2}{2\mathcal{I}_0} (\mathcal{I}_+ j_- + \mathcal{I}_- j_+) .
 \end{aligned}$$

Bis auf den Faktor $\hbar$ ist $\underline{J}$ der Drehimpulsoperator des Kernes, $\underline{L}$ derjenige des Rumpfes und $\underline{j}$ der Gesamtdrehimpulsoperator des Teilchens, alle dargestellt durch die Komponenten in einem mit dem Rumpf verbundenen Koordinatensystem; es ist $\underline{J} = \underline{L} + \underline{j}$. Die Größen $\mathcal{J}_0$ und $\mathcal{J}_3$ sind die Trägheitsmomente des axialsymmetrisch deformierten Rumpfes; J_3 bzw. j_3 die Komponenten von $\underline{J}$ bzw. $\underline{j}$ in Richtung der Symmetrieachse des Rumpfes; $J_{\pm}$, $j_{\pm}$ sind die entsprechenden "Schrauboperatoren". In H_p erkennt man in den beiden zusammengeklammerten Termen den Hamiltonoperator des Nilssonmodells; jetzt ist aber m die reduzierte Masse aus Rumpf- und Teilchenmasse.

Da in diesem Modell die Rumpfmasse als groß angenommen wird und das Teilchen an den Rumpf stark gebunden ist, sind die Anregungsenergien von Teilchen und Rumpfrotation sehr verschieden voneinander. KERMAN zerlegt den Hamiltonoperator in einen ungestörten Anteil $H_0 = H_R + H_p$ und einen Störterm H_c . Die Eigenzustände von H_0 werden durch einen Typ von Wellenfunktionen dargestellt, der auch bei der Behandlung von Molekülen verwendet wird:

$$(26) \quad |JMK\Omega\rangle = \sum_j C_{j\Omega} (|j\Omega\rangle \mathcal{D}_{MK}^J + (-1)^{J-j} |j-\Omega\rangle \mathcal{D}_{M-K}^J).$$

Die Größen $\mathcal{D}_{MK}^J$ sind die Kreiseigenfunktionen mit den Quantenzahlen des Drehimpulsoperators des Gesamtkerns. Die Größen $\sum_j C_{j\Omega} |j\Omega\rangle$ stellen die Eigenzustände zu H_p in Form einer Entwicklung nach Eigenzuständen $|j\Omega\rangle$ des kugelsymmetrischen Nilssonpotentials dar; hierbei sind j und Ω die zu $\underline{j}$ und j_3 gehörigen Quantenzahlen. Da H_p den Term $\frac{\hbar^2}{2\mathcal{J}_0} j^2$ enthält, sind die Eigenwerte $E_p(\Omega)$ von H_p nicht die gleichen wie bei NILSSON.

Die Eigenwerte von H_0 ergeben sich zu:

$$(27) \quad E_0(JK\Omega) = \frac{\hbar^2}{2\mathcal{J}_0} [J(J+1) - K^2 - \Omega^2] + \frac{\hbar^2}{2\mathcal{J}_3} (K^2 - \Omega^2) + E_p(\Omega).$$

KERMAN wählt Zustände $|JMK\Omega\rangle$ mit $K = \Omega$ aus, da im Bereich niedriger Anregungsenergien der Kerne die Rotation des Rumpfes um die Symmetrieachse nicht angeregt ist ($3_3 \ll 3_0$); ein Drehimpuls in Richtung der Symmetrieachse kommt also nur durch die Bewegung des Teilchens zustande.

Für $E_0(JK\Omega)$ folgt dann:

$$(28) \quad E_0(JKK) = \frac{\hbar^2}{2\mathcal{I}_0} [J(J+1) - 2K^2] + E_p(K) .$$

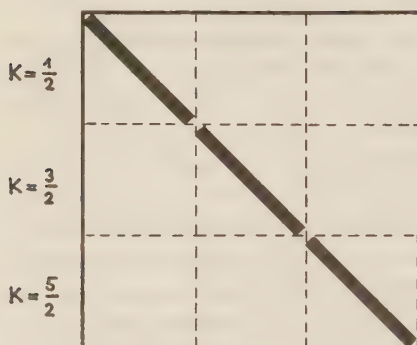
Die Eigenwerte $E_0(JKK)$ zu verschiedenen Deformationen lassen sich als Nilsson-Diagramm auftragen: Auf den modifizierten Nilsson-Niveaus bauen sich Rotationsbanden auf; jeder Bandenkopf ist durch die Quantenzahl K des Drehimpulsoperators J_3 gekennzeichnet.

Der Störoperator H_c liefert Matrixelemente der Form:

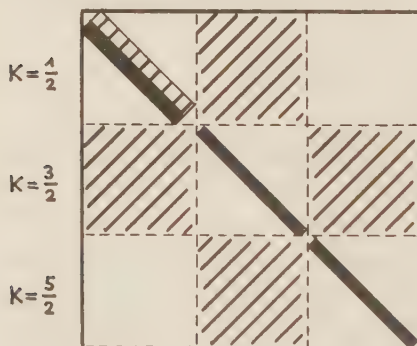
$$(29) \quad \begin{aligned} \langle JK+1 | H_c | JK \rangle &= A_K \sqrt{(J-K)(J+K+1)} \\ \text{mit } A_K &= -\frac{\hbar^2}{2\mathcal{I}_0} \sum_j C_{jK+1}^* C_{jK} \sqrt{(j-K)(j+K+1)} ; \\ \langle J\frac{1}{2} | H_c | J\frac{1}{2} \rangle &= \frac{\hbar^2}{2\mathcal{I}_0} (-1)^{J+\frac{1}{2}} (J+\frac{1}{2}) a \\ \text{mit } a &= \sum_j |C_{j\frac{1}{2}}|^2 (-1)^{j+\frac{1}{2}} (j+\frac{1}{2}) . \end{aligned}$$

a wird "decoupling parameter" genannt.

Zur Diskussion der Berechnung der gestörten Energieeigenwerte stellen wir ungestörte und gestörte Energiematrix durch zwei Schemata (Fig. 4 und Fig. 5) dar, die zum Gesamtdrehimpuls J gehören. Dabei seien die modifizierten Nilsson-Zustände mit gleichem K durch den Index n unterschieden, indem wir für die Eigenzustände von H_0 jetzt $|JMK_n\rangle$ schreiben.

Ungestörte Matrix $\langle H_0 \rangle$ (Fig. 4)

Die schwarz ausgefüllten Rechtecke stellen die Diagonalelemente $\langle H_0 \rangle$ aus den Zuständen $|JMK_1\rangle$, $|JMK_2\rangle$ usw. dar.

Gestörte Matrix $\langle H_0 + H_c \rangle$ (Fig. 5)

Die schraffierten Felder sind mit den Matrixelementen $\langle H_c \rangle$ (29) gefüllt. Für $K = \frac{1}{2}$ gibt es auch Diagonalelemente.

Die Störelemente sind aus den Koeffizienten C_{jK} zu berechnen, die von den Potentialparametern abhängen.

Bei der Berechnung der Energieeigenwerte nach KERMANN sind also folgende drei Aufgaben zu bewältigen:

1. Diagonalisierung des Hamiltonoperators H_p des modifizierten Nilssonmodells
2. Berechnung der Matrixelemente des Störoperators H_c
3. Diagonalisierung von $\langle H_0 + H_c \rangle$ gemäß Fig. 5

Die Durchführung dieses Programms ist recht mühsam. KERMANN diagonalisiert infolgedessen nicht die ganze Matrix (Fig. 5), sondern wählt geeignete (2×2) -Matrizen aus, die den Hauptbeitrag liefern. Außerdem paßt er sein Modell dem Experiment nicht mit den primär gegebenen Modellparametern an, sondern mit den Größen A_K und dem "decoupling parameter" α , wobei die Frage der Widerspruchsfreiheit aller eingeführten Größen offen bleibt.

2. Das Drei-Teilchensystem als Modell eines Atomkerns

Wenn wir den Massenpunkten m_1 und m_2 gleiche Masse M und einen festen Abstand ξ_0 geben, so können wir das so entstandene Gebilde als Modell für den Kernrumpf, den Massenpunkt m_3 als Außennukleon ansehen.

Die Behandlung dieses "Drei-Teilchen-Kernmodells" ist in unseren bisherigen Darlegungen enthalten. Das beim Übergang zu einem festen Abstandswert ξ_0 einzuschlagende Verfahren wurde schon früher erläutert (H.NÄPFEL und H.RUDER [7]). Der Hamiltonoperator (16) bzw. das Differentialgleichungssystem (23), (24) enthalten demnach die Koordinate ξ nur noch in der Form $A = A_0 = \frac{\hbar^2}{M\xi_0^2}$, der Term $-A[\xi]$ ist verschwunden.

Das Trägheitsmoment $\frac{M}{2} q_0^2$ der Hantel entspricht dem Trägheitsmoment $\mathfrak{I}_0$ des Rumpfes bei KERMAN; das Trägheitsmoment um die Hantelachse (Z'-Achse) ist Null. Ein Drehimpuls um die Z'-Richtung wird also nur durch eine Bewegung des Außennukleons mit der Masse m_3 erzeugt. Gegenüber dem Drei-Teilchensystem enthält das Kermanmodell einen Freiheitsgrad mehr, der jedoch durch die Auswahl von Zuständen mit $K = \Omega$ ausgeschaltet wird.

Kermanmodell und "Drei-Teilchenmodell" sind dann völlig äquivalent, wenn in dem letzteren die Wechselwirkung zwischen der Hantel (Rumpf) und dem Massenpunkt m_3 (Teilchen) ebenfalls durch ein Nilssonpotential beschrieben wird. Mit den von uns eingeführten Koordinaten nimmt es die Form an:

$$(30) \quad U_N = \frac{\mu_2}{2} \omega_0^2 \tau^2 - \delta \mu_2 \omega_0^2 \frac{4}{3} \sqrt{\frac{\pi}{5}} \tau^2 Y_{20}(u, 0) + C \frac{1}{k^2} \underline{S}' \cdot \underline{L}' + D \frac{1}{k^2} \underline{L}'^2.$$

Die hier auftretenden Parameter des Potentials, ω_0 , δ , C , D sind genau die gleichen wie bei NILSSON, μ_2 ist die reduzierte Masse aus Hantelmasse und m_3 . Der zweite Term in (30) werde mit $-\delta U_{an}$ bezeichnet. Im Hamiltonoperator des Drei-Teilchensystems (16) ist also $U + H_{SB}$ durch den in (30) gegebenen Ausdruck zu ersetzen.

Die Energieeigenwerte des Drei-Teilchenmodells erhalten wir durch Lösung des entsprechenden Differentialgleichungssystems (23), (24). Die Methode, die wir hierzu anwenden, wird ausführlich bei H. RUDER [6] diskutiert und kann als Entwicklung der inneren Funktionen nach Funktionen eines "ungestörten" Problems gekennzeichnet werden. Die Entwicklungskoeffizienten sind aus einem homogenen Gleichungssystem zu bestimmen, das aus dem Differentialgleichungssystem durch Einsetzen der inneren Funktionen und Integration hervorgeht. Die Energieeigenwerte ergeben sich dann als Nullstellen der Determinante des homogenen Gleichungssystems.

Als "ungestörtes" Problem verwenden wir das Drei-Teilchenmodell ohne den Term $-dU_{an}$. Das zugehörige reduzierte System (Fig. 2) hat folgende Eigenschaften: μ_1 (Bahndrehimpulsoperator $\underline{L}_1$) ist mit festem Abstand g_0 an den Ursprung gebunden, μ_2 (Bahndrehimpulsoperator $\underline{L}_2$, Spinoperator $\underline{S}$) bewegt sich in einem isotropen Oszillatorpotential mit Zentrifugalterm ($D \frac{1}{k^2} \underline{L}_2^2$) und Spin-Bahn-Wechselwirkung ($C \frac{1}{k^2} \underline{L}_2 \cdot \underline{S}$); die Bewegungen von μ_1 und μ_2 erfolgen also unabhängig voneinander.

Die Eigenzustände mit definiertem Gesamtdrehimpuls j werden durch eine Linearkombination von Produkten aus drei Drehimpulseigenfunktionen dargestellt gemäß der Kopplung der Drehimpulsoperatoren im raumfesten Koordinatensystem $\underline{J} = \underline{L}_1 + \underline{J}_2 = \underline{L}_1 + (\underline{S} + \underline{L}_2)$:

$$(31) \quad \psi_{j\mu} = \sum_{m_1, \sigma} C(l_1 j_2 j; m_1 m \mu) C(\frac{1}{2} l_2 j_2; \sigma m_2 m) Y_{l_1 m_1}(\vartheta_1 \varphi_1) \chi(\frac{1}{2} \sigma) R_{n l_2}(\tau) Y_{l_2 m_2}(\vartheta_2 \varphi_2).$$

Zur Definition von Wigner-Koeffizienten und Kugelfunktionen verweisen wir auf ROSE [4]; $\chi(\frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2})$ sind die Paulischen Spinoren, $R_{n l_2}(\tau)$ die normierten Radialfunktionen des isotropen harmonischen Oszillators, die in Anhang C näher definiert sind. Die Eigenzustände (31) werden analog zu RUDER in die Variablen von (23), (24) umgerechnet. Die inneren Funktionen nehmen die Form an:

$$(32) \quad G_{1\nu}^{j\pm} = \sqrt{\frac{2l_1+1}{2\pi}} C(l_1 j_2 j; 0 \nu \nu) C(\frac{1}{2} l_2 j_2; \frac{1}{2} \nu - \frac{1}{2} \nu) R_{n l_2}(\tau) Y_{l_2 \nu - \frac{1}{2}}(u, 0) \\ G_{2\nu}^{j\pm} = \sqrt{\frac{2l_1+1}{2\pi}} C(l_1 j_2 j; 0 \nu \nu) C(\frac{1}{2} l_2 j_2; -\frac{1}{2} \nu + \frac{1}{2} \nu) R_{n l_2}(\tau) Y_{l_2 \nu + \frac{1}{2}}(u, 0).$$

Die Parität ist durch $\pi = (-1)^{l_1+l_2}$ bestimmt.

Tritt zum "ungestörten" Problem der anisotrope Term $-dU_{an}$ hinzu, so sind in (32) die Ausdrücke für die inneren Funktionen durch Summen über die Quantenzahlen l_1, l_2, j_2, n zu ersetzen. Wie bei RUDER an einem übersichtlichen Beispiel erläutert wird, ist es im Falle der Bestimmung der Energieeigenwerte durch ein

Diagonalisierungsverfahren vorteilhaft, die inneren Funktionen direkt nach den normierten Funktionen $\sqrt{2\pi} R_{nl_2}(\tau) Y_{l_2\nu\mp\frac{1}{2}}(u,0)$ zu entwickeln, obwohl dann beim "ungestörten" Problem die Energiematrix nicht diagonal ist.

$$(33) \quad \begin{aligned} G_{1\nu}^{j\pm} &= \sum_{l_2, n} C_{1\nu l_2 n}^{j\pm} \sqrt{2\pi} R_{nl_2}(\tau) Y_{l_2\nu\mp\frac{1}{2}}(u,0) \\ G_{2\nu}^{j\pm} &= \sum_{l_2, n} C_{2\nu l_2 n}^{j\pm} \sqrt{2\pi} R_{nl_2}(\tau) Y_{l_2\nu\mp\frac{1}{2}}(u,0) \end{aligned} \quad \nu = \frac{1}{2}, \dots, j$$

Die Struktur der Energiematrizen für "ungestörtes" Problem und Drei-Teilchenmodell zeigen die schematisierten Matrizen in Fig. 6 und Fig. 7, die zum Gesamtdrehimpuls j gehören.

Im ersten Fall (Fig. 6) ist jede innere Funktion nur eine Funktion vom Typ $\sqrt{2\pi} R_{nl_2}(\tau) Y_{l_2\nu\mp\frac{1}{2}}(u,0)$. Dem Differentialgleichungssystem (23), (24) ist zu entnehmen, daß jedes " ν -Kästchen" auf der Hauptdiagonale und den je zwei benachbarten Diagonalen von einem Matricelement besetzt ist.

Im zweiten Fall (Fig. 7) sind die inneren Funktionen Summen der Entwicklungsfunktionen. Deshalb entarten alle Matricelemente in den " ν -Kästchen" von Fig. 6 zu Untermatrizen in Diagonalform; den Untermatrizen der Hauptdiagonale werden noch die Störmatrizen mit den Elementen

$$(34) \quad \langle \sqrt{2\pi} R_{n'l_2'} Y_{l_2'\nu\mp\frac{1}{2}}(u,0) | -dU_{an} | \sqrt{2\pi} R_{nl_2} Y_{l_2\nu\mp\frac{1}{2}}(u,0) \rangle$$

überlagert.

Wir sind damit an einem Punkt angelangt, wo wir unsere Methode zur Berechnung der Energieeigenwerte mit derjenigen von KERMAN vergleichen können.

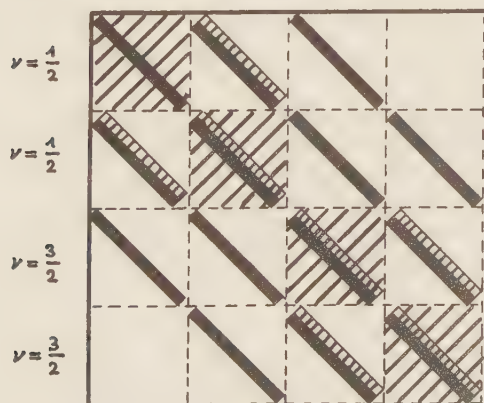
Die Energieeigenwerte werden bei uns durch Diagonalisierung einer einzigen Matrix (Fig. 7) erhalten. Die Energiematrix des "ungestörten" Problems ist im Gegensatz zu KERMAN

Energiamatrix des "ungestörten" Problems (Fig. 6)



Die Feinschraffur kennzeichnet den Anteil der Matrixelemente, der von der Spin-Bahn-Wechselwirkung herrührt.

Energiamatrix des Drei-Teilchenmodells (Fig. 7)



Die Grobschraffur deutet die Matrixelemente von $-\delta U_{an}$ an.

nichtdiagonal; ihre Energieeigenwerte werden jedoch bei der Diagonalisierung der Matrix (Fig. 7), die notwendigerweise mit einem Rechenprogramm an einer Datenverarbeitungsanlage durchgeführt werden muß, für $\delta = 0$ miterhalten.

Da das Modell an das Experiment anzupassen ist, wird man zur besseren Übersicht entsprechende Nilssondiagramme zu verschiedenen Parametersätzen A_0 , C, D aufstellen. Bei KERMEN müssen für jeden Satz von δ , C, D die Koeffizienten C_{jk} aus dem ersten Diagonalisierungsverfahren und mit diesen die Matrixelemente (29) für das zweite Diagonalisierungsverfahren bestimmt werden. Es ist daher verständlich, weshalb KERMEN den "decoupling parameter" α und die Größen A_k zur Anpassung verwendet.

Bei unserer Methode gehen die primär gegebenen Modellparameter auf einfache und übersichtliche Weise in den Diagonalisierungsprozess ein. Die zu diagonalisierende Matrix (Fig. 7) läßt sich folgendermaßen zerlegen:

$$(35) \quad M = M(0) + \delta M(U_{an}) + A_0 M(J) + C M(SP) + D M(Z) .$$

Im einzelnen bedeuten $M(0)$ eine Diagonalmatrix mit Energieeigenwerten des isotropen harmonischen Oszillators, $M(U_{an})$ eine Matrix mit den Elementen (34) bis auf den Faktor δ , $M(J)$ eine Matrix, die bis auf den Faktor A_0 alle mit A_0 multiplizierten Elemente von Fig. 7 darstellt, $M(SP)$ und $M(Z)$ Matrizen, welche analog zu $M(J)$ durch die Matrixelemente der Spin-Bahn-Wechselwirkung und des Zentrifugaltermes definiert sind. Die Elemente von $M(U_{an})$ sind bei NILSSON zu finden. Alle anderen Matrizen sind einfach zu berechnen, wie man sich leicht am Differentialgleichungssystem (23), (24) überzeugt.

Zur Diagonalisierung der Matrix (35) wird ein Rechenprogramm von RUDER [6] übernommen, das sich bei ähnlichen Problemen bewährt hat. Dieses Programm ist so gestaltet, daß in die Datenverarbeitungsanlage die Matrizen $M(0)$, $M(U_{an})$, $M(J)$, $M(SB)$, $M(Z)$ sowie die Parametersätze δ , A_0 , C , D als voneinander unabhängige Dateneinheiten eingegeben werden. Daher ist die eigentliche Rechenarbeit in der Aufstellung der fünf Matrizen zu suchen; es sei noch angemerkt, daß sich die Matrizen (35) zu verschiedenem Gesamtdrehimpuls nur durch die Matrizen $M(J)$ unterscheiden.

Es zeigt sich also, daß die hier gegebene Lösungstheorie die Behandlung eines Kernmodells erlaubt, welches zwar physikalisch demjenigen von KERMAN weitestgehend entspricht, wobei sich jedoch bei unserer Methode eine recht einfache Bestimmung der Energieeigenwerte ergibt. Eine Folge davon ist, daß die primär gegebenen Modellparameter (Potential des Außennukleons, Trägheitsmoment des Rumpfes) auf einfache und eindeutige Weise durch Anpassung an das experimentelle Termschema erhalten werden.

3. Numerische Rechnungen zum Drei-Teilchen-Kernmodell

Wir beschränken uns auf Zustände, die im Bereich der tieferen Oszillatorschalen liegen.

Als Entwicklungsfunktionen für die inneren Funktionen wählen wir Oszillatoreigenfunktionen aus der Schale $N = 1$ bzw. $N = 2$, da wir wie NILSSON die Kopplung mit den übernächsten Schalen, also $N = 3$ bzw. $N = 0, 4$, vernachlässigen.

Um die numerischen Ergebnisse im Zusammenhang mit dem Diagramm von NILSSON zu diskutieren, halten wir uns an die Bezeichnungen von NILSSON. Im Differentialgleichungssystem

setzen wir $\tau = \left(\frac{\hbar}{\mu_2 \omega_0}\right)^{\frac{1}{2}} \tau'$ und $E = \hbar \omega_0 E'$ und schreiben im folgenden statt der dimensionslosen Größen τ' , E' wieder τ , E . Dann geht (30) über in:

$$(36) \quad U_N = \frac{1}{2} \tau^2 - \delta \frac{4}{3} \sqrt{\frac{\pi}{5}} \tau^2 Y_{20}(u, 0) - \frac{\delta}{\eta} 2 \frac{1}{\hbar^2} \underline{S}' \cdot \underline{L}'_2 - \frac{\delta}{\eta} \mu \frac{1}{\hbar^2} \underline{L}'_2{}^2.$$

Die Definition der dimensionslosen Parameter δ , η , μ ist wie bei NILSSON:

$$(37) \quad \eta = \frac{\delta}{\kappa} \left[1 - \frac{4}{3} \delta^2 - \frac{16}{27} \delta^3 \right]^{-\frac{1}{6}}, \quad \kappa = -\frac{1}{2} \frac{C}{\hbar \omega_0}, \quad \mu = \frac{2D}{C}.$$

Der Modellparameter $A_0 = \frac{\hbar^2}{M g_0^2}$ geht in den dimensionslosen Ausdruck $\frac{\hbar}{M g_0^2 \omega_0}$ über; dieser sei wieder mit A_0 bezeichnet. Den letzten Term von (36) lassen wir wie NILSSON weg, da wir nur die Schalen $N = 1, 2$ betrachten. Wir führen noch die Größe

$$\xi = \frac{\delta}{\eta} = \kappa \left[1 - \frac{4}{3} \delta^2 - \frac{16}{27} \delta^3 \right]^{\frac{1}{6}}$$

ein; da der Deformationsparameter δ im Intervall $-0,3 \leq \delta \leq 0,3$ liegen soll, folgt: $\xi \approx \kappa$. Die Beziehung (35) geht dann über in

$$(38) \quad M = M(0) + \delta M(U_{an}) + A_0 M(J) + \xi M(SB).$$

a) $N = 1$

Die inneren Funktionen lauten:

$$G_{1\nu}^{j\pm} = C_{1\nu 10}^{j\pm} \sqrt{2\pi} R_{01}(\tau) Y_{1\nu-\frac{1}{2}}(u, 0)$$

$$G_{2\nu}^{j\pm} = C_{2\nu 10}^{j\pm} \sqrt{2\pi} R_{01}(\tau) Y_{1\nu+\frac{1}{2}}(u, 0)$$

Analog zu BOHR und MOTTELSON wählen wir solche Zustände aus, die wir bei der Austauschoperation E_{12} mit "symmetrisch" bezeichnet haben. Aus den Symmetrieforderungen für die inneren

Funktionen (22) folgt, daß wir es bei $N = 1$ mit Zuständen ungerader Parität zu tun haben; also $G_{1\nu}^{j+} = G_{2\nu}^{j+} = 0$.

Aus dem Differentialgleichungssystem (23), (24) erhalten wir z. B. für $j = \frac{1}{2}$, $j = \frac{3}{2}$ folgende Matrizen:

$$\begin{array}{ll}
 j = \frac{1}{2} & M(0) = \begin{vmatrix} \frac{5}{2} & 0 \\ 0 & \frac{5}{2} \end{vmatrix} & M(U_{an}) = \begin{vmatrix} -\frac{2}{3} & 0 \\ 0 & \frac{1}{3} \end{vmatrix} \\
 & M(J) = \begin{vmatrix} 4 & 2\sqrt{2} \\ 2\sqrt{2} & 2 \end{vmatrix} & M(SB) = \begin{vmatrix} 0 & -\sqrt{2} \\ -\sqrt{2} & 1 \end{vmatrix} \\
 j = \frac{3}{2} & M(0) = \begin{vmatrix} \frac{5}{2} & 0 \\ 0 & \frac{5}{2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{5}{2} \end{vmatrix} & M(U_{an}) = \begin{vmatrix} -\frac{2}{3} & 0 \\ 0 & \frac{1}{3} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{3} \end{vmatrix} \\
 & M(J) = \begin{vmatrix} 4 & -\sqrt{2} & -\sqrt{6} \\ -\sqrt{2} & 5 & -\sqrt{3} \\ -\sqrt{6} & -\sqrt{3} & 3 \end{vmatrix} & M(SB) = \begin{vmatrix} 0 & -\sqrt{2} & 0 \\ -\sqrt{2} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{vmatrix}
 \end{array}$$

Für $j \geq \frac{3}{2}$ treten stets (3×3) -Matrizen auf.

b) $N = 2$

Die inneren Funktionen lauten:

$$\begin{aligned}
 G_{1\nu}^{j\pm} &= C_{1\nu 01}^{j\pm} \sqrt{2\pi} R_{10}(\tau) Y_{0\nu-\frac{1}{2}}(u, 0) + C_{1\nu 20}^{j\pm} \sqrt{2\pi} R_{02} Y_{2\nu-\frac{1}{2}}(u, 0) \\
 G_{2\nu}^{j\pm} &= C_{2\nu 01}^{j\pm} \sqrt{2\pi} R_{10}(\tau) Y_{0\nu+\frac{1}{2}}(u, 0) + C_{2\nu 20}^{j\pm} \sqrt{2\pi} R_{02} Y_{2\nu+\frac{1}{2}}(u, 0)
 \end{aligned}$$

Die Symmetrieforderungen (22) für symmetrische Zustände lassen nur Zustände mit gerader Parität zu, so daß nur die Funktionen $G_{1\nu}^{j+}$ und $G_{2\nu}^{j+}$ auftreten.

Entsprechend zu oben erhalten wir für $j = \frac{1}{2}$ (3×3)-Matrizen, für $j = \frac{3}{2}$ (5×5)-Matrizen und für alle $j \geq \frac{5}{2}$ (6×6)-Matrizen. Als Beispiel geben wir die Matrizen für $j = \frac{5}{2}$ an:

$$M(0) = \begin{vmatrix} \frac{7}{2} & & & & & \\ & \frac{7}{2} & & & & \\ & & \frac{7}{2} & & & \\ & & & \frac{7}{2} & & \\ & & & & \frac{7}{2} & \\ & & & & & \frac{7}{2} \end{vmatrix} \quad M(U_{\text{an}}) = \begin{vmatrix} 0 & \frac{2}{3}\sqrt{2} & & & & \\ \frac{2}{3}\sqrt{2} & -\frac{2}{3} & & & & \\ & & -\frac{1}{3} & & & \\ & & & -\frac{1}{3} & & \\ & & & & \frac{2}{3} & \\ & & & & & \frac{2}{3} \end{vmatrix}$$

$$M(j) = \begin{vmatrix} 6 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 12 & -\sqrt{24} & -\sqrt{48} & 0 & 0 \\ 0 & -\sqrt{24} & 14 & -\sqrt{8} & -\sqrt{32} & 0 \\ 0 & -\sqrt{48} & -\sqrt{8} & 12 & 2 & -\sqrt{20} \\ 0 & 0 & -\sqrt{32} & 2 & 9 & -\sqrt{5} \\ 0 & 0 & 0 & -\sqrt{20} & -\sqrt{5} & 5 \end{vmatrix} \quad M(SB) = \begin{vmatrix} 0 & & & & & \\ & 0 & -\sqrt{6} & & & \\ -\sqrt{6} & 1 & & & & \\ & & & -1 & -2 & \\ & & & -2 & 2 & \\ & & & & & -2 \end{vmatrix}$$

Die Matrizen wurden für verschiedene Parametersätze δ , A_0 , ξ und verschiedene Werte von j diagonalisiert. Die erhaltenen Energieeigenwerte sind als Funktion des Deformationsparameters δ in den Figuren 8, 9 und 10 dargestellt.

Wir betrachten zunächst den Fall kleiner A_0 -Werte, d.h. großer Trägheitsmomente des Rumpfes. In Fig. 8 ist $A_0 = 0,0010$. Dieser Wert liegt* beispielsweise dann vor, wenn der Rumpf aus zwei α -Teilchen mit dem sehr großen gegenseitigen Abstand von ca. $20 \cdot 10^{-13}$ cm bestehen würde. Im Grenzfall $A_0 \rightarrow 0$ ergeben sich die - nicht gesondert eingezeichneten - Energieniveaus

*in der Kernphysik

des Nilssonmodells. Die Aufspaltung entspricht den verschiedenen Werten des Gesamtdrehimpulses j , die wegen der Mitbewegung des Rumpfes möglich sind.

In Fig. 9 ist $A_0 = 0,0050$; der obige Abstand wäre ca. $10 \cdot 10^{-13}$ cm. Die Nilsson-niveaus spalten in diesem Fall schon wesentlich stärker auf.

Fig. 10 stellt den Fall $A_0 = 0,0167$ dar; der obige Abstand wäre ca. $5 \cdot 10^{-13}$ cm, also eine für das gewählte Beispiel einigermaßen sinnvolle Größe. Das Eigenwertspektrum wird hier stark von der Mitbewegung des Rumpfes bestimmt; die gezeichneten Rotationsbanden überlappen sich innerhalb einer Oszillatorschale beträchtlich.

Auf der Ordinate ($\delta = 0$) sind wieder die Energieeigenwerte des "ungestörten" Problems zu finden.

Herrn Professor Dr. H.VOLZ danke ich für sein wohlwollendes Interesse an dieser Arbeit und für viele nützliche Anregungen.

Ferner waren die zahlreichen Diskussionen mit Herrn H.RUDER für diese Arbeit sehr fördernd.

Die numerischen Rechnungen wurden an einer Datenverarbeitungsanlage Siemens DVA 2002 ausgeführt. Der Firma Siemens möchte ich für die großzügig zur Verfügung gestellte Rechenzeit danken.

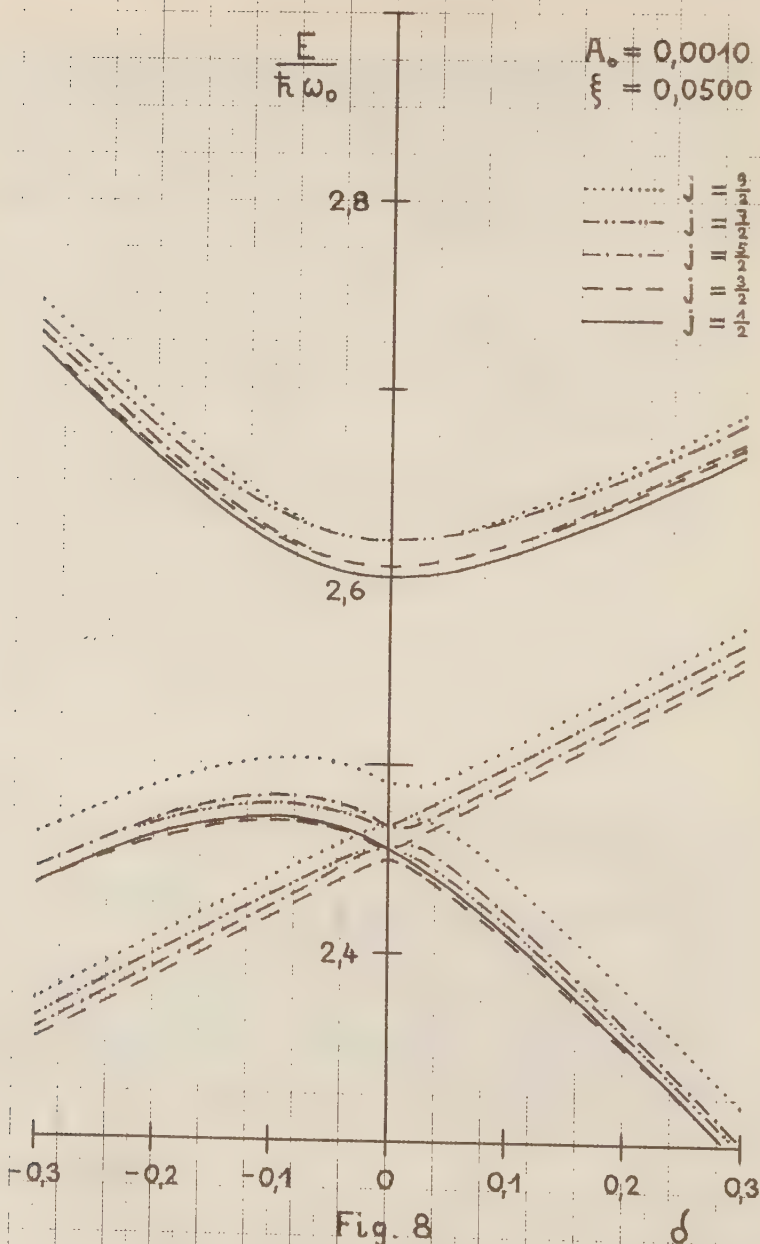


Fig. 8

$$\frac{E}{\hbar \omega_0}$$

$$A_0 = 0,0050$$

$$\xi = 0,0500$$

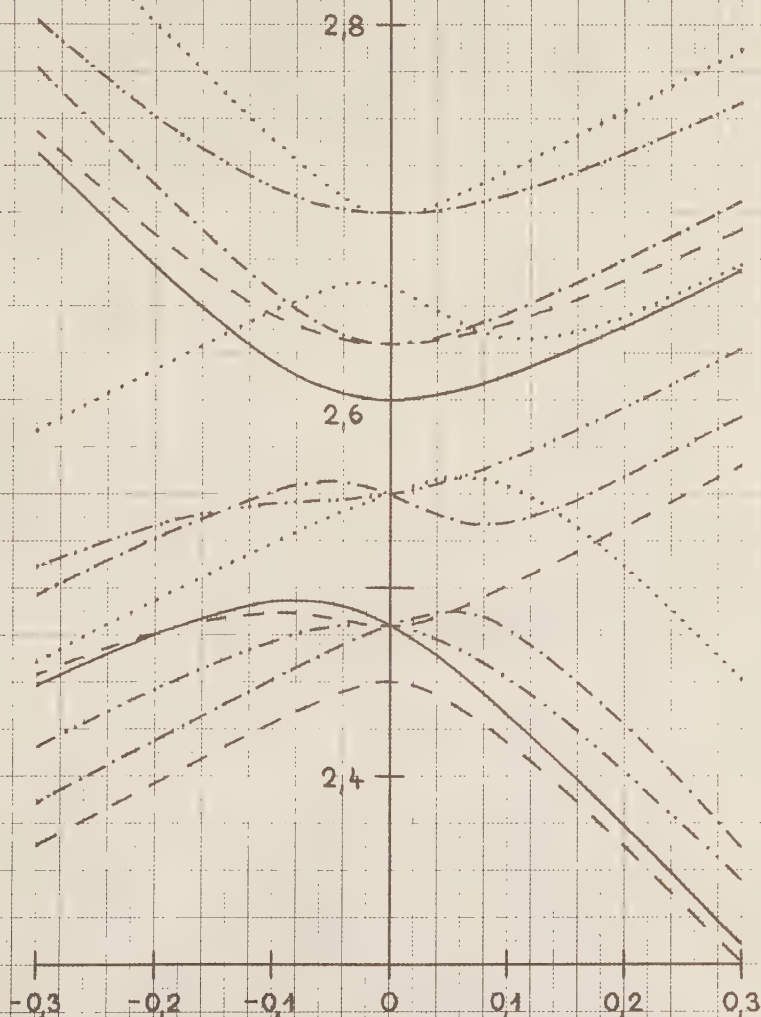


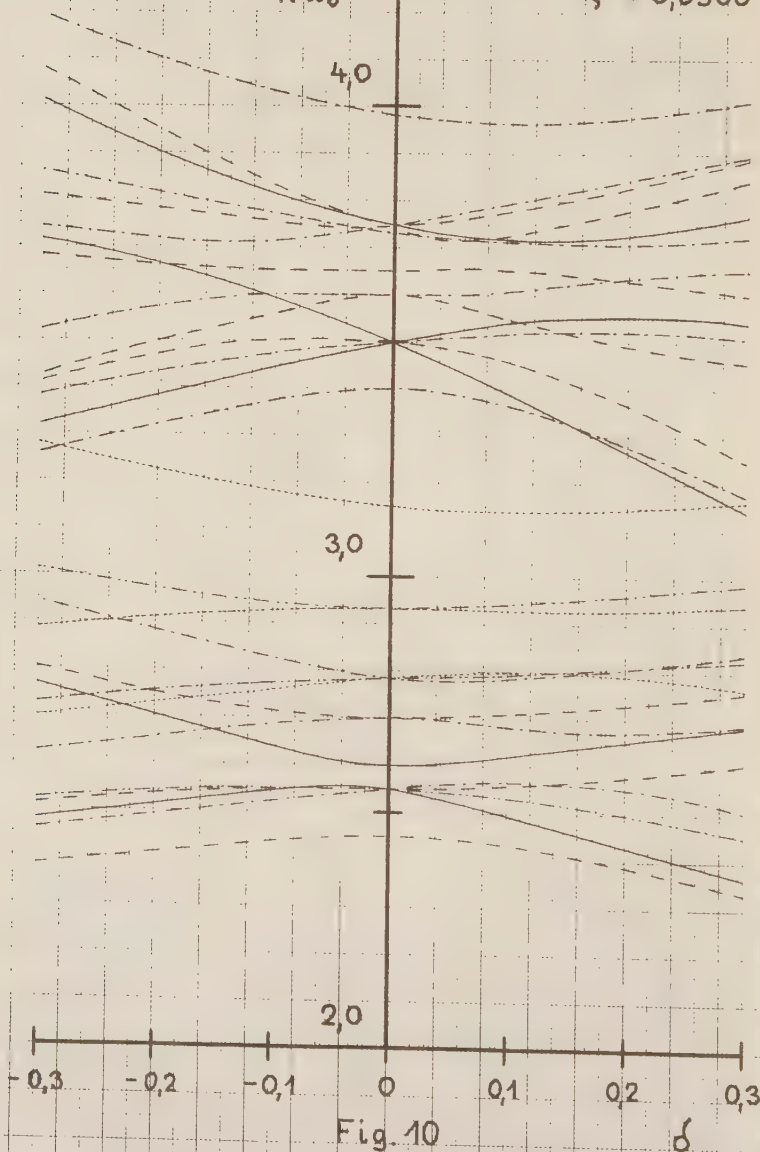
Fig. 9

6

$$\frac{E}{\hbar \omega_0}$$

$$A_0 = 0,0167$$

$$\xi = 0,0500$$



V. ANHANGA. Bestimmung des Drehimpulses aus infinitesimalen Drehungen

Wird ein System von Massenpunkten (Koordinaten q_i , Impulse p_i) um eine beliebige Achse durch den Ursprung des raumfesten Koordinatensystems um den infinitesimalen Winkel $\vec{\delta\varphi}$ gedreht, so erhält man die Koordinatenänderungen δq_i mit Hilfe der Erzeugenden der infinitesimalen kanonischen Transformation S:

$$S = \sum_i q_i P_i + \vec{\delta\varphi} \cdot \vec{f}(q_i, P_i) .$$

Die Zerlegung des infinitesimalen Drehvektors $\vec{\delta\varphi}$ in die Komponenten $\delta\varphi_1, \delta\varphi_2, \delta\varphi_3$ erfolge auf beliebige Achsen, die jedoch ein orthogonales Dreibein bilden sollen; die Größe $\vec{f}$ ist der Drehimpuls des Systems. Mit

$$q_k = \frac{\partial S}{\partial P_k} = q_k + \sum_{\ell=1}^3 \delta\varphi_\ell \frac{\partial f_\ell}{\partial P_k} \quad \text{folgt:} \quad \delta q_k = q_k - q_k \approx \sum_{\ell=1}^3 \delta\varphi_\ell \frac{\partial f_\ell}{\partial P_k} .$$

Andererseits hängen die durch die Drehung um $\vec{\delta\varphi}$ verursachten Koordinatenänderungen δq_k eindeutig und linear mit den Komponenten des Drehvektors $\delta\varphi_1, \delta\varphi_2, \delta\varphi_3$ zusammen:

$$\delta q_k = \sum_{\ell=1}^3 g_{k\ell}(q_i) \delta\varphi_\ell ;$$

hierbei treten die Größen $g_{k\ell}$ auf, die Funktionen der Koordinaten q_i sind. Dann folgt mit oben:

$$\sum_{\ell=1}^3 \left(g_{k\ell}(q_i) - \frac{\partial f_\ell}{\partial P_k} \right) \delta\varphi_\ell = 0 .$$

Da die $\delta\varphi_\ell$ beliebig sind, ist die Summe nur dann gleich Null, wenn die Koeffizienten bei den $\delta\varphi_\ell$ verschwinden. Also:

$$g_{k\ell}(q_i) = \frac{\partial f_\ell}{\partial P_k} \quad \text{für } \ell = 1, 2, 3 \text{ und alle } k.$$

Die Integration der partiellen Differentialgleichungen für festen Index l ergibt:

$$f_l = \sum_k g_{kl}(q_i) p_k, \quad l = 1, 2, 3.$$

Die Größen f_l sind die Komponenten des Drehimpulses auf die durch die Zerlegung von $\widehat{\delta\varphi}$ definierten Achsen.

Explizite Ausdrücke für die Größen g_{kl} werden erhalten, wenn man an einer Figur, in welcher die Koordinaten q_k des Systems eingetragen sind (siehe Fig. 3), die Änderungen der Koordinaten bei infinitesimalen Drehungen um die gewählten Achsen untersucht.

Dreht man nicht das ganze System, sondern einen einzelnen Massenpunkt, so erhält man nach dieser Methode den Drehimpuls des entsprechenden Massenpunktes.

B. Formelsammlung

$$L_1'^2 y_{1\mu\nu}^{j\pm} = \hbar^2 \left\{ \left[j(j+1) + \frac{3}{4} - \nu \right] y_{1\mu\nu}^{j\pm} - \sqrt{(j-\nu+1)(j+\nu)} y_{2\mu\nu+1}^{j\pm} \right\},$$

$$L_2'^2 y_{2\mu\nu}^{j\pm} = \hbar^2 \left\{ \left[j(j+1) + \frac{3}{4} + \nu \right] y_{2\mu\nu}^{j\pm} - \sqrt{(j-\nu)(j+\nu+1)} y_{1\mu\nu+1}^{j\pm} \right\},$$

$$L_z'^2 y_{1\mu\nu}^{j\pm} = \hbar^2 \left(\nu - \frac{1}{2} \right)^2 y_{1\mu\nu}^{j\pm},$$

$$L_z'^2 y_{2\mu\nu}^{j\pm} = \hbar^2 \left(\nu + \frac{1}{2} \right)^2 y_{2\mu\nu}^{j\pm};$$

$$\begin{aligned} O y_{1\mu\nu}^{j\pm} = & -\hbar^2 \left\{ \sqrt{(j-\nu+1)(j+\nu)} \left[-\frac{\partial}{\partial u} - \left(\nu - \frac{1}{2} \right) \cot u \right] y_{1\mu\nu-1}^{j\pm} \right. \\ & - \left[\frac{\partial}{\partial u} - \left(\nu - \frac{1}{2} \right) \cot u \right] y_{2\mu\nu}^{j\pm} + \\ & \left. + \sqrt{(j-\nu)(j+\nu+1)} \left[\frac{\partial}{\partial u} - \left(\nu - \frac{1}{2} \right) \cot u \right] y_{1\mu\nu+1}^{j\pm} \right\}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \bar{O} \, y_{2\mu\nu}^{j\pm} = & -\hbar^2 \left\{ \sqrt{(j-\nu+1)(j+\nu)} \left[-\frac{\partial}{\partial u} - (\nu+\frac{1}{2}) \cot u \right] y_{2\mu\nu-1}^{j\pm} - \right. \\ & \left. - \left[-\frac{\partial}{\partial u} - (\nu+\frac{1}{2}) \cot u \right] y_{1\mu\nu}^{j\pm} + \right. \\ & \left. + \sqrt{(j-\nu)(j+\nu+1)} \left[\frac{\partial}{\partial u} - (\nu+\frac{1}{2}) \cot u \right] y_{2\mu\nu+1}^{j\pm} \right\}, \end{aligned}$$

$$\text{mit } \bar{O} = L_+' \left[\hbar \frac{\partial}{\partial u} + \cot u L_z' \right] + L_-' \left[-\hbar \frac{\partial}{\partial u} + \cot u L_z' \right];$$

$$S'_+ L_z' y_{1\mu\nu}^{j\pm} = \frac{\hbar^2}{2} \left\{ (\nu-\frac{1}{2}) y_{1\mu\nu}^{j\pm} + \left[\frac{\partial}{\partial u} - (\nu-\frac{1}{2}) \cot u \right] y_{2\mu\nu}^{j\pm} \right\},$$

$$S'_- L_z' y_{2\mu\nu}^{j\pm} = \frac{\hbar^2}{2} \left\{ -(\nu+\frac{1}{2}) y_{2\mu\nu}^{j\pm} + \left[-\frac{\partial}{\partial u} - (\nu+\frac{1}{2}) \cot u \right] y_{1\mu\nu}^{j\pm} \right\};$$

$$L_z'^2 y_{1\mu\frac{1}{2}}^{j\pm} = \hbar^2 (j+\frac{1}{2}) \left[j+\frac{1}{2} \mp (-1)^{j-\frac{1}{2}} \right] y_{1\mu\frac{1}{2}}^{j\pm};$$

$$\begin{aligned} \bar{O} \, y_{1\mu\frac{1}{2}}^{j\pm} = & -\hbar^2 \left\{ [-1 \pm (j+\frac{1}{2})(-1)^{j-\frac{1}{2}}] \frac{\partial}{\partial u} y_{2\mu\frac{1}{2}}^{j\pm} + \right. \\ & \left. + \sqrt{(j-\frac{1}{2})(j+\frac{3}{2})} \frac{\partial}{\partial u} y_{1\mu\frac{3}{2}}^{j\pm} \right\}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \bar{O} \, y_{2\mu\frac{1}{2}}^{j\pm} = & -\hbar^2 \left\{ [-1 \pm (j+\frac{1}{2})(-1)^{j-\frac{1}{2}}] \left[-\frac{\partial}{\partial u} - \cot u \right] y_{1\mu\frac{1}{2}}^{j\pm} + \right. \\ & \left. + \sqrt{(j-\frac{1}{2})(j+\frac{3}{2})} \left[\frac{\partial}{\partial u} - \cot u \right] y_{2\mu\frac{3}{2}}^{j\pm} \right\}. \end{aligned}$$

C. Radialfunktionen des isotropen harmonischen Oszillators

$$\begin{aligned} R_{n\ell_2} = & \lambda^{\frac{3}{4}} \sqrt{2} \frac{\sqrt{\Gamma(n+\ell_2+\frac{3}{2})}}{\sqrt{n!} \Gamma(\ell_2+\frac{3}{2})} (\lambda r^2)^{\frac{\ell_2}{2}} e^{-\frac{1}{2}\lambda r^2} \times \\ & \times {}_1F_1(-n, \ell_2+\frac{3}{2}; \lambda r^2) \quad \text{mit } \lambda = \frac{\mu_2 \omega_0}{\hbar}. \end{aligned}$$

L i t e r a t u r v e r z e i c h n i s

- [1] E.P.WIGNER, Group Theory, Acad. Press, New York 1959
- [2] E.SCHRÖDINGER, Ann. d. Phys. 79, 361 (1926)
- [3] D.S.HUGHES und C.ECKART, Phys. Rev. 36, 694 (1930)
- [4] M.E.ROSE, Elementary Theory of Angular Momentum,
Wiley, New York 1963
- [5] F.REICHE und H.RADEMACHER, Z. Physik 39, 444 (1926)
- [6] H.RUDER, Dissertation Erlangen 1967
- [7] H.NÄPFEL und H.RUDER, Diplomarbeiten (unveröffentlicht)
Erlangen 1964
- [8] A.BOHR und B.R.MOTTETSON, Kgl. Danske Videnskab.
Selskab, Mat. Fys. Medd. 27, 16 (1953)
- [9] D.L.HILL und J.A.WHEELER, Phys. Rev. 89, 1102 (1953)
- [10] S.A.MOSZKOWSKI, Phys. Rev. 99, 803 (1955)
- [11] S.G.NILSSON, Kgl. Danske Videnskab. Selskab, Mat. Fys.
Medd. 29, 16 (1955)
- [12] A.K.KERMAN, Kgl. Danske Videnskab. Selskab, Mat. Fys.
Medd. 30, 15 (1956)

L e b e n s l a u f

Am 8. März 1939 wurde ich in München als erster Sohn des Revisionsoberingenieurs Wilhelm Näpfel und seiner Ehefrau Luise, geb. Schauer geboren.

Im Jahre 1945 trat ich in die Volksschule in Treuchtlingen ein, 1949 in die Oberrealschule mit Gymnasium in Weißenburg, Bayern. Ab 1953 besuchte ich die Dürer-Oberrealschule in Nürnberg, wo ich im Jahre 1958 die Reifeprüfung ablegte.

Im Wintersemester 1958/59 begann ich an der Universität Erlangen-Nürnberg das Studium der Physik. Am 2. 11. 1961 legte ich die Diplomvorprüfung und am 6. 5. 1964 die Diplomhauptprüfung ab.

Seit Mai 1963 bin ich am Institut für Theoretische Physik als wissenschaftliche Hilfskraft bzw. als Verwalter der Dienstgeschäfte eines wissenschaftlichen Assistenten tätig.

Erlangen, 12. April 1967

Offsetdruck - Fotodruck

Josef Hogl

8520 Erlangen, Hauptstr. 109, (Nähe Martin-Luther-Platz,) Tel. 22990

Offsetdruck - Fotodruck

- J. HögI, 8520 Erlangen, Hauptstr. 109, (Nähe Martin-Luther-Platz) Telefon 22990 -